Kristallstrukturen tiefschmelzender organischer Verbindungen

Hans-Georg Wussow

1980

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41543910_0028

KRISTALLSTRUKTUREN TIEFSCHMELZENDER ORGANISCHER VERBINDUNGEN

Pyridin und Pyridin-Trihydrat
Mesitylen und Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1)
Acetonitril, Isocyanomethan und Propin

I n a u g u r a l - D i s s e r t a t i o n

zur Erlangung des Doktorgrades der
Mathematisch - Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Düsseldorf

vorgelegt von
Hans-Georg Wussow
aus Mennighüffen
Düsseldorf 1980

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Referent: Prof. Dr. D. Mootz
Korreferent: Prof. Dr. H.-H. Perkampus
Tag der mündlichen Prüfung: 27. 6. 1980

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung 3

2. Allgemeines zu den Untersuchungsmethoden 4
2.1 Einkristallzucht und Durchführung der Messungen 4
2.2 Rechnerische Verfahren der Röntgenstrukturanalyse 6

3. Die Kristallstrukturen von Pyridin und Pyridin-Trihydrat 9
3.1 Das Schmelzdiagramm Pyridin - Wasser 10
3.2 Strukturbestimmungen 11
3.3 Beschreibung der Strukturen 16

4. Die Kristallstrukturen von Mesitylen (1,3,5-Trimethylbenzol) und Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1) 27
4.1 Das Schmelzdiagramm Mesitylen - Bromwasserstoff 28
4.2 Strukturbestimmungen 30
4.3 Beschreibung der Strukturen 35

5. Die Kristallstrukturen der isosteren Verbindungen Acetonitril, Isocyanomethan und Propin 42
5.1 Strukturbestimmungen 43
5.2 Diskussion und Vergleich der Strukturen 47
5.3 Zur Polymorphie von Acetonitril und Isocyanomethan 57

6. Zusammenfassung 60

7. Verzeichnis der benutzten Rechenprogramme 61

8. Literaturverzeichnis 62

9. Strukturfaktortabellen 67

1. Einleitung

Das Ziel von Röntgenstrukturanalysen an Molekülkristallen ist es in den meisten Fällen, die Konstitution, Konfiguration oder auch Konformation von Molekülen zu ermitteln und Zahlenwerte für Bindungslängen und Bindungswinkel zu erhalten. Bei der vorliegenden Arbeit war die Zielsetzung eine etwas andere, da es sich bei den untersuchten Substanzen um relativ einfache Moleküle oder Addukte von solchen handelt, deren Molekülstrukturen teilweise mit spektroskopischen Methoden schon sehr genau bestimmt worden waren. Über die Packung in Molekülkristallen solcher tiefschmelzender organischer Verbindungen liegen dagegen verhältnismäßig wenige Informationen vor. Gerade in den Kristallstrukturen kleiner, einfach gebauter Moleküle sollten sich sterische Einflüsse und solche der Dipolmomente auf die Packung deutlicher erkennen lassen als bei großen organischen Molekülen mit ihrer oft komplizierten Struktur. Das Schwergewicht der Arbeit soll daher auf der Beschreibung der Anordnung der Moleküle im Kristallverband liegen.

Die untersuchten Substanzen sind im einzelnen: Pyridin als einfachster sechsgliedriger Heteroaromat und sein Hydrat, das durch Differenzthermoanalyse als Trihydrat charakterisiert wurde; Mesitylen als symmetrisch substituiertes Trimethylbenzol, das als relativ starke Lewisbase Komplexe mit kovalenten Halogeniden bildet; das Addukt von Mesitylen mit Bromwasserstoff, für das sich - wie beim Pyridin-Trihydrat - keine Vorhersage über die Art der Wechselwirkung zwischen beiden Komponenten machen ließ und schließlich Acetonitril, Isocyanomethan und Propin mit jeweils linearen dreiatomigen (außer Wasserstoffatomen) CO_2-isosteren Molekülen, deren Ähnlichkeit untereinander einen Vergleich ihrer Kristallstrukturen besonders interessant erscheinen ließ. Die ermittelten kristallographischen Daten und Atomkoordinaten könnten als Grundlage für spätere Bestimmungen von Elektronendichten und Packungsanalysen unter mehr theoretischen Gesichtspunkten dienen.

2. Allgemeines zu den Untersuchungsmethoden

Da alle sieben Verbindungen nur bei tiefen Temperaturen kristallin zu erhalten sind, war die Benutzung spezieller Verfahren zur Zucht von Einkristallen notwendig, die wie Rechenverfahren der Röntgenstrukturanalyse in diesem Kapitel dargestellt werden.

2.1 Einkristallzucht und Durchführung der Messungen

Die Zucht von Einkristallen für die Strukturbestimmungen erfolgte in allen Fällen direkt auf dem Diffraktometer ($P2_1$ der Firma Syntex mit dem von Steffen (1980) modifizierten Tieftemperaturzusatz LT-1). Die Probe befindet sich in einem Markröhrchen (0.2 mm Durchmesser) auf einem Goniometerkopf und wird axial von einem Kaltgasstrom mit regelbarer Temperatur umspült. Um den zur Kristallzucht notwendigen Temperaturgradienten zu erzeugen, wurden hier zwei Verfahren benutzt. In beiden Fällen kommt es darauf an, das zunächst vorliegende, polykristalline Material bis auf möglichst wenige Kristallkeime aufzuschmelzen und dann die Phasengrenze fest-flüssig durch fortschreitende Erstarrung langsam durch den gesamten Inhalt des Röhrchens wandern zu lassen. Beim ersten Verfahren wurde eine für den Gebrauch am Diffraktometer modifizierte Bridgman-Apparatur (Simon et al., 1976) verwendet, bei der das Röhrchen von der Spitze an in seiner ganzen Länge eine heizbare Blende durchwandert, die den Kaltgasstrom vom unteren Teil des Röhrchens fernhält, in dem der Inhalt somit flüssig bleibt. Beim zweiten Verfahren wurde der Kaltgasstrom durch eine unmittelbar neben der Probe angebrachte Glühwendel geheizt. Durch langsames Herunterregeln der Heizspannung ließ sich die Wanderung der Phasengrenze erreichen. Der Kristallisationsvorgang wurde im polarisierten Licht kontrolliert. Einen Eindruck von der Qualität eines Kristalles ergaben dann Rotations- und Achsenaufnahmen.

Erster Schritt einer Strukturanalyse ist die Bestimmung der Metrik des Translationsgitters. Die Gitterkonstanten und ihre Standardabweichungen lassen sich aus den optimierten Winkelpositionen von bis zu fünfzehn hochindizierten Reflexen nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmen.

Die Intensitätsmessung erfolgte in allen Fällen im Omega-scan mit von der Reflexintensität abhängiger Scangeschwindigkeit. Trotz der ungünstigen Form der Kristalle, deren Länge ihren Durchmesser häufig um einen Faktor zehn oder mehr übertrifft, brauchten wegen Benutzung von MoKα-Strahlung und damit Beschränkung im 2θ-Bereich keine Volumen- oder Absorptionskorrekturen durchgeführt zu werden, so daß bei der Datenreduktion nur die üblichen Lorentz- und Polarisationskorrekturen angebracht wurden.

Differenzthermoanalyse

Alle Differenzthermoanalysen wurden in der von Ohms (1979) und Mootz, Ohms und Poll (1980) beschriebenen Apparatur durchgeführt, bei der ein Dewargefäß, das den Probenhalter aufnimmt, zunächst auf die Temperatur von flüssigem Stickstoff abgekühlt wird. Die Temperatur gleicht sich nach Verdampfen des Stickstoffs mit annähernd konstanter Geschwindigkeit von etwa $30^{\circ}C/h$ der Raumtemperatur an. Alle Messungen wurden somit in Aufheizphase durchgeführt.

Simon-Guinier-Technik

Simon-Guinier-Aufnahmen wurden auf der entsprechenden Kamera der Firma Enraf-Nonius durchgeführt. Diese erlaubt die Aufnahme von Röntgen-Pulverdiagrammen von Proben, die ein zu wählendes Temperaturprogramm durchlaufen und ermöglicht so die Abbildung von Phasenumwandlungen.

2.2 Rechnerische Verfahren der Röntgenstrukturanalyse

Ziel einer Kristallstrukturanalyse mit Röntgenbeugungsmethoden ist die Bestimmung der Koordinaten (und thermischen Parameter) sämtlicher Atome in der Elementarzelle. Dabei besteht folgender Zusammenhang zwischen der Elektronendichtefunktion $\rho(x,y,z)$ und dem Strukturfaktor F(hkl):

$$\rho(x,y,z) = 1/V \sum_{hkl}\sum\sum F(hkl)\exp[-2\pi i(hx+ky+lz)] \qquad (1)$$

Dabei sind h,k,l die Indices eines Reflexes und x,y,z relative (auf die Achsenlängen bezogene) Koordinaten von Punkten in der Elementarzelle. Der Strukturfaktor ist andererseits gegeben durch

$$F(hkl) = \sum_{n=1}^{N} f_n(hkl)\exp[2\pi i(hx_n+ky_n+lz_n)] = |F(hkl)|\ \exp[i\phi(hkl)] \qquad (2)$$

was einer phasenrichtigen Summierung der von jedem der N Atome in der Elementarzelle (Koordinaten x_n, y_n, z_n) ausgehenden Streuwellen entspricht. Der Streubeitrag $f_n(hkl)$ ist dabei das Produkt des sogenannten, von $\sin\theta/\lambda$ abhängigen Atomformfaktors f_n^o des betreffenden Atoms und eines Korrekturglieds, das der isotropen oder anisotropen thermischen Bewegung des Atomes Rechnung trägt:

$$f_n(hkl) = f_n^o\exp(-B\ \sin^2\theta/\lambda^2) \quad \text{(isotrop)}$$

$$f_n(hkl) = f_n^o\exp[-1/4(B_{11}h^2a^{*2} + \ldots . 2B_{23}klb^*c^*)] \quad \text{(anisotrop)} \qquad (3)$$

Aus den durch die Messung erhaltenen Reflexintensitäten sind durch die Datenreduktion nur die Absolutbeträge der in der Regel komplexen Strukturfaktoren, die sogenannten Strukturamplituden, zu erhalten; Information über die Phasen wird bei der Messung nicht erhalten, so daß Gleichung (1) zur Bestimmung

der Atompositionen aus den sich ergebenden Maxima der Elektronendichtefunktion noch nicht anwendbar ist.

Zur Lösung dieses sogenannten Phasenproblems wurde in dieser Arbeit in den meisten Fällen das Programm MULTAN (Germain, Main, Woolfson, 1970) verwendet, das mit Direktmethoden arbeitet. Diese beruhen darauf, daß zwischen den Phasen ϕ_H, ϕ_K und ϕ_{H-K} dreier Reflexe H, K und H-K (die Großbuchstaben sollen hier Indextripel darstellen) mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit folgende Beziehung gilt:

$$\phi_H \sim \phi_K + \phi_{H-K} \tag{4}$$

Die Wahrscheinlichkeit, mit der (4) gilt, ist dabei um so höher, je größer die E-Werte (auf fiktive punktförmige Atome ohne thermische Bewegung umgerechnete Strukturfaktoren) der beteiligten Reflexe sind.

Strategie des Programms MULTAN ist es, ausgehend von einem kleinen Satz von Startphasen verfeinerte Phasen für eine größere Zahl von Reflexen mit E-Werten oberhalb einer wählbaren Grenze zu bestimmen. Dazu werden die Beziehung (4) und die sogenannte bewichtete Tangensformel (5) verwendet:

$$\tan \phi_H = \frac{\sum_K w_K w_{H-K} |E_K E_{H-K}| \sin(\phi_K + \phi_{H-K})}{\sum_K w_K w_{H-K} |E_K E_{H-K}| \cos(\phi_K + \phi_{H-K})} \tag{5}$$

Für den Startphasensatz werden dabei bis zu drei Reflexe verwendet, deren Phasen festgelegt werden können, um den Ursprung zu fixieren. Hinzu kommen wenige andere, die an möglichst vielen Beziehungen (4) beteiligt sind. Da für diese Reflexe keine Phasen bekannt sind, werden alle Permutationen von Phasen durchprobiert, die diesen Reflexen versuchsweise zugewiesen werden. Auf diese Weise erhält man eine Reihe von Phasensätzen, deren Qualität sich nach bestimmten Kriterien beurteilen läßt. Mit den bestimmten E-Werten als Koeffizienten lassen

sich Fouriersynthesen der Elektronendichteverteilung nach (1) mit E statt F berechnen, auf englisch sogenannte E-maps. In einer im wesentlichen richtig phasierten E-map lassen sich in der Regel die Nichtwasserstoffatome lokalisieren. Noch fehlende lassen sich mit verbesserter Phasierung durch die ermittelte Teilstruktur aus Fouriersynthesen erhalten.

Nächster Schritt der Strukturanalyse ist die Verfeinerung der Ortsparameter und B-Werte, wobei im Endstadium einer Verfeinerung die Nichtwasserstoffatome meistens anisotrop behandelt werden. Nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate wird die Größe

$$M = \sum_{hkl} w_{hkl}(|F_o(hkl)| - 1/q|F_c(hkl)|)^2 \qquad (6)$$

minimiert. Der Skalierungsfaktor q der beobachteten Strukturamplituden $|F_o|$ wird als 1/q bei den berechneten $|F_c|$ mitverfeinert. Das Gewicht eines Reflexes, w_{hkl}, wurde in dieser Arbeit mit einer Ausnahme gemäß

$$1/w = \sigma(F)^2 + (0.02 \times F_o)^2 \qquad (7)$$

berechnet. Reflexe mit $F_o < 3.92\,\sigma(F)$ wurden als unbeobachtet eingestuft und bei der Verfeinerung nicht benutzt. In die Verfeinerung lassen sich auch die Parameter von Wasserstoffatomen einbeziehen, die in Differenz-Fouriersynthesen (mit $|F_o|-|F_c|$ als Koeffizienten) lokalisiert werden können.

Ein Maß für die Übereinstimmung zwischen dem errechneten Modell und der tatsächlichen Struktur ist der R-Wert:

$$R = \frac{\sum_n ||F_o| - |F_c||}{\sum_n |F_o|}$$

oder

$$R_w = \sqrt{\frac{\sum_n w(|F_o|-|F_c|)^2}{\sum_n w|F_o|^2}}\,, \qquad (8)$$

der bewichtete R-Wert. In dieser Arbeit werden R und R_w sowie die entsprechenden Größen R' und R_w' angegeben, die unter Einbeziehung der als unbeobachtet eingestuften Reflexe berechnet sind.

3. Die Kristallstrukturen von Pyridin und Pyridin-Trihydrat

Während die Kristallstruktur des Benzols bereits seit den zwanziger Jahren wiederholt Objekt von Röntgen- und Neutronenbeugungsexperimenten war (Bacon et al., 1964), lagen über kristallines Pyridin vergleichsweise wenige Ergebnisse vor. Biswas (1958) fand bei -180°C zwei verschiedene Röntgen-Pulverdiagramme, die sich orthorhombisch indizieren ließen. Stabilitätsbereiche und Kristallisationsbedingungen der beiden Phasen konnten weder von ihm noch später von Loisel und Lorenzelli (1967) festgestellt werden. Diese Autoren erhielten zwei etwas unterschiedliche IR-Pulverspektren, von denen sie eines einer reinen orthorhombischen, das andere einem Gemisch zweier Phasen zuordneten. Castellucci et al. (1969) schließlich konnten bei ebenfalls IR-spektroskopischen Untersuchungen an perdeuteriertem Pyridin eine Phasenumwandlung beobachten, nicht jedoch bei Pyridin-H_5. Wie alle bereits zitierten Autoren schlossen sie auf das Vorliegen von acht Molekülen in allgemeiner Lage einer orthorhombischen Raumgruppe; zusätzlich vermuteten sie, daß die C_2-Achsen der Moleküle etwa parallel zu einer Fläche der Elementarzelle verlaufen.

Auffällig ist, daß das Pyridin mit -41.7°C einen deutlich tieferen Schmelzpunkt besitzt als Benzol (+5.5°); ähnlich wie bei den Paaren Naphthalin (80°) und Chinolin (-15.6°) sowie Anthracen und Acridin (218° bzw. 111°) sollte der deutlich niedrigere Schmelzpunkt des Stickstoffaromaten auf dessen niedrigere molekulare Symmetrie zurückzuführen sein. Einfluß auf die Packung können dabei die weniger symmetrische Elek-

tronenverteilung und in sterischer Hinsicht die "Lücke" am nicht wasserstoffsubstituierten Stickstoffatom haben.

Im Schmelzdiagramm des quasibinären Systems Pyridin-Wasser deutet ein Knick in der Liquiduskurve auf die Existenz eines inkongruent schmelzenden Hydrats hin, welches von Ewert (1937) als Dihydrat angesehen wurde. Um aus dem Verlauf der Soliduslinien, die bisher nicht festgelegt wurden, die Zusammensetzung bestätigen oder richtigstellen zu können, wurde das Schmelzdiagramm durch Differenz-Thermoanalyse neu aufgenommen.

Die Kristallstruktur des Pyridin-Hydrats sollte durch Wasserstoffbrückenbindungen bestimmt sein, für die das N-Atom als Proton-Akzeptor und die Sauerstoffatome sowohl als Donatoren als auch als Akzeptoren in Frage kommen. Vergleichbare Systeme dieser Art liegen in einer Reihe höherer Hydrate von Alkylaminen vor, die interessante clathratähnliche Kristallstrukturen haben (Jeffrey, 1969).

3.1 Das Schmelzdiagramm Pyridin-Wasser

Zur Aufnahme des Schmelzdiagramms wurden die Proben unterschiedlicher Zusammensetzung durch Mischung passender Volumina destillierten Wassers und getrockneten und destillierten Pyridins hergestellt und unter Kühlung mit flüssigem Stickstoff am Vakuum in Duranglas-Ampullen eingeschmolzen. Als Referenz diente Schamottepulver.

Der von Ewert (1937) gefundene Verlauf der Liquiduslinien konnte im wesentlichen bestätigt werden. Danach liegt das Eutektikum bei -65°C und 58 Mol-%, das Peritektikum bei -29.5° und 36 Mol-% Pyridin. Eutektische Effekte ließen sich im Bereich zwischen 25 und 100 Mol-% Pyridin messen (Abb. 3.1). Als einzige intermediäre stabile Phase in diesem System liegt damit das inkongruent schmelzende Trihydrat vor.

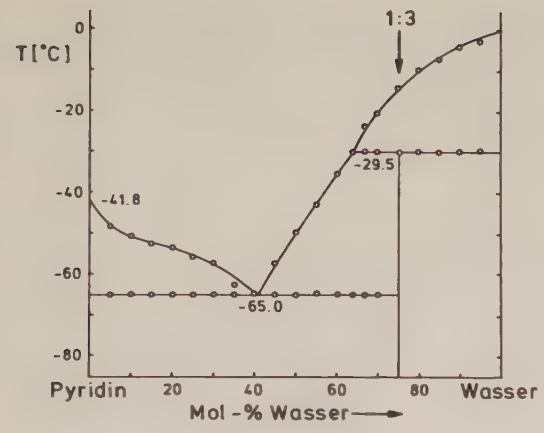


Abb. 3.1 Das Schmelzdiagramm Pyridin-Wasser mit eingetragenen Meßpunkten

3.2 Strukturbestimmungen

Pyridin

Ein Einkristall wurde nach dem Bridgman-Verfahren gezogen und bei -83°C vermessen (Tab. 3.1). Achsenaufnahmen ergaben die Lauegruppe mmm; die gefundenen systematischen Auslöschungen

0 k l nur vorhanden für k + l = 2n und

h 0 l nur vorhanden für h = 2n

lassen keine Unterscheidung zwischen den Raumgruppen P nam (konventionell P nma) und P na2_1 zu. Bei dem festgestellten Zellvolumen und einer geschätzten Dichte um 1 Mg/m³ müßte die asymmetrische Einheit in der zentrosymmetrischen Raumgruppe P nam mit achtzähliger allgemeiner Punktlage zwei Moleküle enthalten, in der azentrischen Raumgruppe P na2_1 sogar vier. Der Kristall hatte nur ein mäßiges Streuvermögen; bis $2\theta = 50°$ wurden 719 von 1679 unabhängigen Reflexen als beobachtet eingestuft.

Tab. 3.1 Kristallographische Daten und Angaben zu Datensammeln und Strukturbestimmung von Pyridin und Pyridintrihydrat. In Klammern hier wie in allen folgenden Tabellen die geschätzten Standardabweichungen, bezogen auf die letzte angegebene Stelle.

	C_5H_5N	$C_5H_5N.3H_2O$
Meßtemperatur [°C]	-83	-50
Gitterkonstanten [pm]	a= 1763.8(6) b= 900.6(3) c= 1139.5(3)	1244.6(3) 1783.2(6) 679.1(2)
Volumen $[10^{-6}pm^3]$	1810(1)	1507.2(8)
Raumgruppe; Z	P $na2_1$; 16	P bca; 8
Ber. Dichte $[Mg/m^3]$	1.16	1.17
$2\theta_{max}$	50°	60°
Zahl der Reflexe; davon beobachtet	1679; 719	2188; 932
R; R_w	0.092; 0.097	0.074; 0.070
R'; R_w'	0.181; 0.111	0.172; 0.088

Die Lösung der Struktur erwies sich in P nam als nicht möglich. Bei einem Versuch in der azentrischen Raumgruppe konnten dagegen in einer E-map alle vier unabhängigen Ringe lokalisiert werden. Nach einer ersten Verfeinerung ließen sich Kohlenstoff- und Stickstoffatome unterscheiden. Bei Behandlung aller Atome als Kohlenstoff zeigte in jedem Ring ein Atom einen abnorm kleinen isotropen B-Wert, verhielt sich dann bei weiterer Behandlung als Stickstoff jedoch normal. Eine anisotrope Verfeinerung der thermischen Parameter erwies sich als nicht sinnvoll; mit einem Verhältnis von dann 216 zu variierenden Parametern gegenüber 719 Beobachtungen war die resultierende Verbesserung des R-Wertes nicht signifikant. Daher wurde zu einer isotropen Behandlung des Strukturmodells zurückgekehrt. Die Ortsparameter der zwanzig Wasserstoffatome

wurden nach stereochemischen Vorstellungen konstruiert und wie ihre zu $5.10^4 pm^2$ vorgegebenen B-Werte fixiert gehalten. Da sich bei der anschließenden Verfeinerung die Schweratomlagen signifikant verschoben, wurden die Wasserstoffpositionen neu konstruiert und analog weiterverfahren. Die endgültigen Parameter sind in Tab. 3.2 enthalten; der abschließende R-Wert lag bei 0.092.

Pyridin-Trihydrat

Ein Einkristall wurde aus einer Lösung mit 40 Mol-% Pyridin erhalten und bei -50°C untersucht (Tab. 3.1). In der auf Grund der systematischen Auslöschungen

0 k l nur vorhanden für k = 2n
h 0 l nur vorhanden für l = 2n
h k 0 nur vorhanden für h = 2n

eindeutig festliegenden Raumgruppe P bca ergibt sich mit dem gefundenen Zellvolumen und einer Formeleinheit $C_5H_5N.3H_2O$ in der asymmetrischen Einheit eine plausible Dichte von 1.17 Mg/m^3.

Bis $2\theta=60°$ wurden 2188 unabhängige Reflexe gesammelt, von denen 932 als beobachtet eingestuft wurden. In einer E-map konnten alle neun Nichtwasserstoffatome lokalisiert werden. Nach ihrer isotropen und anisotropen Verfeinerung ergaben sich aus einer Differenz-Fouriersynthese vernünftige Positionen für alle Wasserstoffatome. Nach Entfernung von fünf schwachen Reflexen mit schlechtem Meßprofil, für die Umweganregung anzunehmen war (ihren berechneten Strukturamplituden standen um einen Faktor vier größere beobachtete gegenüber) ergab eine abschließende Verfeinerung (Schweratome mit anisotropen, Wasserstoffatome mit isotropen thermischen Parametern) Konvergenz bei einem R-Wert von 0.073 und den Parametern der Tabelle 3.3.

Tab. 3.2 Pyridin: Koordinaten und isotrope B-Werte [10^4 pm^2] aller Atome. Alle fixiert gehaltenen Parameter ohne Standardabweichungen. Die z-Koordinate von N(11) ist wegen der polaren c-Achse fixiert. Alle Atome in der allgemeinen Lage (4a) der Raumgruppe P $na2_1$. Die Bezifferung der Wasserstoffatome entspricht der der zugehörigen Kohlenstoffatome.

Atom	x	y	z	B
N(11)	0.168(1)	0.705(2)	0.0	4.3(3)
C(12)	0.130(1)	0.616(2)	0.080(2)	4.5(4)
C(13)	0.052(1)	0.615(2)	0.087(2)	4.7(4)
C(14)	0.011(1)	0.703(1)	0.013(2)	5.5(4)
C(15)	0.053(1)	0.788(2)	-0.073(2)	4.5(4)
C(16)	0.129(1)	0.780(2)	-0.072(2)	3.1(4)
N(21)	0.123(1)	0.290(1)	0.258(2)	4.5(3)
C(22)	0.083(1)	0.222(1)	0.177(2)	3.0(3)
C(23)	0.073(1)	0.073(2)	0.172(2)	4.5(3)
C(24)	0.112(1)	-0.018(1)	0.242(2)	5.2(4)
C(25)	0.161(1)	0.044(2)	0.327(2)	5.2(4)
C(26)	0.165(1)	0.197(2)	0.329(2)	5.2(4)
N(31)	0.080(1)	0.695(1)	0.506(1)	4.2(3)
C(32)	0.128(1)	0.781(2)	0.583(2)	6.2(6)
C(33)	0.208(1)	0.768(2)	0.577(2)	4.4(4)
C(34)	0.237(1)	0.678(2)	0.499(2)	4.1(3)
C(35)	0.192(1)	0.604(2)	0.423(2)	5.0(4)
C(36)	0.116(1)	0.615(2)	0.429(2)	3.8(4)
N(41)	0.113(1)	0.108(1)	0.746(2)	4.3(3)
C(42)	0.077(1)	0.191(2)	0.822(2)	3.2(3)
C(43)	0.087(1)	0.346(2)	0.834(2)	3.1(3)
C(44)	0.142(1)	0.409(1)	0.763(2)	4.6(3)
C(45)	0.183(1)	0.323(2)	0.681(2)	4.9(4)
C(46)	0.163(1)	0.178(2)	0.677(2)	5.9(5)
H(12)	0.162	0.548	0.136	5.
H(13)	0.024	0.547	0.148	5.
H(14)	-0.048	0.709	0.018	5.
H(15)	0.024	0.854	-0.145	5.
H(16)	0.158	0.854	-0.147	5.
H(22)	0.057	0.287	0.111	5.
H(23)	0.034	0.028	0.112	5.
H(24)	0.107	-0.134	0.234	5.
H(25)	0.198	-0.022	0.344	5.
H(26)	0.202	0.246	0.383	5.
H(32)	0.103	0.855	0.642	5.
H(33)	0.243	0.829	0.628	5.
H(34)	0.296	0.664	0.495	5.
H(35)	0.217	0.536	0.358	5.
H(36)	0.084	0.556	0.366	5.

Fortsetzung der Tab. 3.2

Atom	x	y	z	B
H(42)	0.037	0.139	0.876	5.
H(43)	0.055	0.409	0.893	5.
H(44)	0.154	0.522	0.767	5.
H(45)	0.225	0.369	0.625	5.
H(46)	0.190	0.112	0.671	5.

Tab. 3.3 Pyridin-Trihydrat: Koordinaten und thermische Parameter [10^4pm^2] aller Atome. Die Wasserstoffatome tragen als ersten bzw. einzigen Index den des zugehörigen Kohlenstoff- oder Sauerstoffatoms. Alle Atome in der allgemeinen Lage (8c) der Raumgruppe P bca.

Atom	x	y	z	B(isotrop)
N(1)	0.5379(3)	0.2651(2)	0.1140(5)	
C(2)	0.5059(4)	0.1940(3)	0.1297(7)	
C(3)	0.5728(3)	0.1334(2)	0.1113(7)	
C(4)	0.6799(4)	0.1458(3)	0.0777(7)	
C(5)	0.7163(4)	0.2184(3)	0.0631(7)	
C(6)	0.6434(4)	0.2754(3)	0.0816(6)	
O(1)	0.4442(2)	0.4068(2)	0.1466(5)	
O(2)	0.3144(2)	0.4374(2)	0.4644(5)	
O(3)	0.3796(3)	0.4966(2)	0.8343(6)	
H(2)	0.434(3)	0.187(2)	0.149(6)	3(1)
H(3)	0.543(3)	0.086(3)	0.130(6)	4(1)
H(4)	0.728(4)	0.105(2)	0.056(8)	6(1)
H(5)	0.798(4)	0.226(2)	0.056(7)	5(1)
H(6)	0.667(3)	0.326(3)	0.085(6)	4(1)
H(11)	0.460(4)	0.363(3)	0.149(8)	6(1)
H(12)	0.411(5)	0.417(3)	0.254(10)	8(2)
H(21)	0.337(4)	0.454(2)	0.561(7)	3(1)
H(22)	0.259(5)	0.458(3)	0.419(9)	7(2)
H(31)	0.434(5)	0.523(3)	0.822(9)	6(2)
H(32)	0.394(4)	0.468(3)	0.928(10)	7(2)

	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
N(1)	3.9(2)	2.6(2)	3.0(2)	0.6(1)	0.1(1)	0.0(1)
C(2)	2.7(2)	3.8(2)	3.7(2)	0.2(2)	0.1(2)	-0.1(2)
C(3)	3.6(2)	2.6(2)	4.0(2)	-0.3(2)	-0.5(2)	0.1(2)
C(4)	3.7(2)	3.6(2)	4.6(3)	1.3(2)	-0.3(2)	0.1(2)
C(5)	2.7(2)	4.9(2)	4.1(2)	-0.1(2)	-0.1(2)	0.3(2)
C(6)	4.7(2)	3.0(2)	3.0(2)	-0.9(2)	-0.5(2)	0.3(2)
O(1)	3.3(1)	2.5(1)	3.7(2)	0.4(1)	0.0(1)	0.2(1)
O(2)	2.5(1)	3.3(1)	3.6(1)	0.0(1)	-0.3(1)	0.3(1)
O(3)	3.1(1)	4.2(2)	3.7(2)	0.8(1)	-0.5(1)	-0.5(1)

3.3 Beschreibung der Strukturen

Die Molekülstruktur von Pyridin ist mit Hilfe der Mikrowellenspektroskopie sehr genau bestimmt worden (Sorensen et al., 1974). Die hier vorliegenden Ergebnisse der Röntgenstrukturanalyse sind demgegenüber auf Grund der geringen Überbestimmung deutlich weniger präzise; die Standardabweichungen für Bindungslängen und Valenzwinkel liegen um 2-3 pm bzw. 1-2°. Auch als chemisch äquivalent anzusehende Bindungen weichen zum Teil um das Sechsfache der Standardabweichungen voneinander ab. Bei Mittelung über äquivalente Bindungen und Winkel in allen vier Molekülen ergibt sich ein Bild, das qualitativ mit den Ergebnissen der oben erwähnten spektroskopischen Arbeit übereinstimmt: Es liegen etwas kürzere N-C- als C-C-Bindungen vor (135 gegenüber 138 pm) und der Winkel am Stickstoffatom ist auf 116° verkleinert (Tab. 3.4). Die Bindungslängen sind hier wie überall in dieser Arbeit nicht auf thermische Bewegung korrigiert.

Tab. 3.4 Pyridin: Bindungslängen [pm] und Bindungswinkel in den vier unabhängigen Molekülen mit n=1,2,3,4 sowie gemittelte Werte.

	n=1	n=2	n=3	n=4	Mittelwerte	
N(n1) - C(n2)	138	133	144	130	C - N	135
N(n1) - C(n6)	127	137	131	136		
C(n2) - C(n3)	140	136	143	141	$C_\alpha - C_\beta$	138
C(n5) - C(n6)	135	138	134	136		
C(n3) - C(n4)	136	134	130	138	$C_\beta - C_\gamma$	138
C(n4) - C(n5)	144	140	136	142		
C(n2)-N(n1)-C(n6)	118°	115°	115°	117°	C - N - C	116°
N(n1)-C(n2)-C(n3)	121	123	120	125	N - C - C	124
N(n1)-C(n6)-C(n5)	125	125	124	126		
C(n2)-C(n3)-C(n4)	119	121	119	116	$C - C_\beta - C$	118
C(n4)-C(n5)-C(n6)	118	117	121	115		
C(n3)-C(n4)-C(n5)	118	119	121	121	$C - C_\gamma - C$	120

Ein auffälliges Merkmal der Kristallstruktur ist, daß die C_2-Achsen von zwei der vier unabhängigen Moleküle etwa parallel zur a-, die der beiden anderen parallel zur b-Achse liegen. Diese beiden Orientierungen werden durch die Symmetrieoperationen der Raumgruppe nicht ineinander überführt (Abb. 3.2). Insgesamt liegen damit alle molekularen C_2-Achsen ungefähr senkrecht zur c-Achse, und zwar bei $z = n/4$ mit $n=1,2,3,4$. Die sich damit ergebenden Schichten sind abwechselnd nur von Molekülen einer Orientierung besetzt.

In der Schicht bei $z = 0$ liegen die Dipole aller Moleküle parallel zur a-Achse. Da die Ringnormalen einen Winkel von 40° mit der a-Gleitspiegelebene bilden, gibt es zwei unterschiedliche Neigungen der Ringebenen. Die Schicht bei $z = 1/2$ läßt sich durch die zweizählige Schraubenachse parallel zur c-Achse erzeugen; in ihr bestehen daher analoge Verhältnisse.

Die Schicht bei $z = 1/4$ besteht aus Molekülen, deren Ringebenen alle parallel zueinander liegen. Die Dipole verlaufen parallel und antiparallel zur b-Achse. Durch Anwendung der 2_1-Achse wird die Schicht bei $z = 3/4$ erzeugt. Die Ringebenen aller Moleküle dieser Schicht liegen damit wieder parallel zueinander und sind um etwa 85° gegenüber denen in der Schicht bei $z = 1/4$ geneigt. Innerhalb einer der Ebenen senkrecht zur c-Achse haben somit alle Moleküle entweder parallele Ausrichtung der Dipolmomente oder aber der Ringebenen.

Die Ringzentren aller vier Moleküle lassen sich durch Symmetrieoperationen in Ebenen bei $y = 1/4$ und $3/4$ und bei $x = n/8$ ($n = 1,3,5,7$) bringen. Abb. 3.2 läßt die Art der Packung in den Schichten senkrecht zur b-Achse erkennen; ganz analoge Verhältnisse herrschen in den Schichten senkrecht zur a-Achse. Ein Molekül mit seiner Symmetrieachse in der Schicht ist von vier Molekülen der anderen Ausrichtung umgeben, von denen zwei mit den Schmalseiten ihrer Ringe auf das (substituentenfreie) Stickstoffatom zeigen und die beiden anderen mit ihren Ringflächen das andere Ende des Moleküls in der Mitte umhüllen.

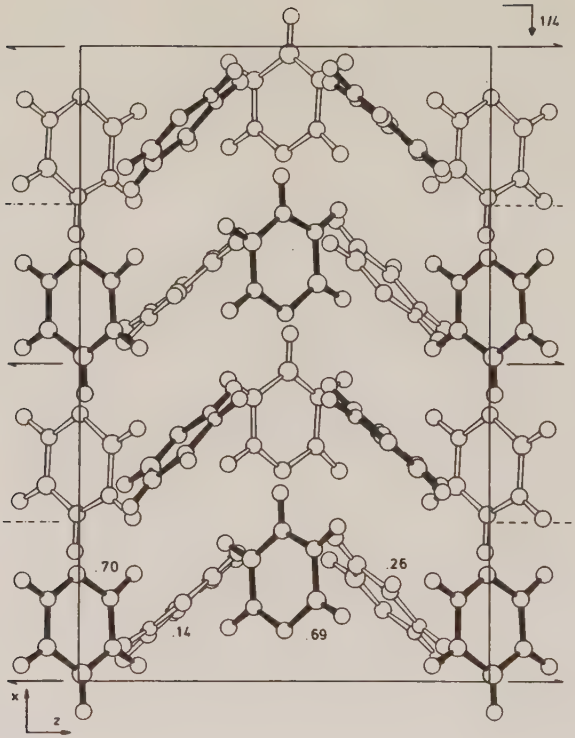


Abb. 3.2 Die Elementarzelle des Pyridins mit dem Symmetriegerüst der Raumgruppe P na2_1 (Projektion gegen die positive b-Achse). Für die vier unabhängigen Moleküle der Tab. 3.2 (1-4 mit größer werdender z-Koordinate) sind die y-Koordinaten ihrer Ringmittelpunkte angegeben. Diese betragen also für die dick gezeichneten etwa 3/4, für die anderen etwa 1/4. Diese Zeichnung wie alle anderen außer schematischen Darstellungen wurde mit dem Zeichenprogramm OR TEP erstellt. In dieser und der nächsten Abbildung stellen die Kreise die Bereiche 20%-iger Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Nichtwasserstoffatome dar.

Zwei weitere Moleküle mit antiparallelen Dipolen sind der Länge nach etwas gegenüber dem Zentralmolekül versetzt, so daß alle H-Atome auf Lücke stehen. In den beiden Nachbarschichten hat jedes Molekül vier weitere Nachbarn. Moleküle jeweils einer der beiden Orientierungen sitzen auf den Ecken eines verzerrten Würfels, in dessen Mittelpunkt und über dessen Flächen Moleküle der anderen Orientierung angeordnet sind. Die Situation entspricht damit dem einfachen kubisch-innenzentrierten Gitter des Wolfram-Typs, in dem ebenfalls die Koordinationszahl 14 (8+6) auftritt; die hier betrachtete Schichtung senkrecht zur b-Achse läßt sich mit der Netzebenenschar (1 1 0) der Wolframstruktur vergleichen. Die Abweichungen von diesem Idealfall äußern sich schon im Achsenverhältnis a:b:c = 1.96:1:1.27 statt $2:1:\sqrt{2}$.

Für alle vier unabhängigen Moleküle ergibt sich im wesentlichen die gleiche Umgebung. Es treten keine besonders kurzen intermolekularen Abstände auf; die kürzesten Kontakte zwischen Wasserstoffatomen liegen um 250 pm, die zwischen Stickstoff- und Wasserstoffatomen bei 270 pm und damit im Bereich normaler van der Waalsscher Abstände.

Die prinzipielle Gleichartigkeit der Umgebung aller vier Moleküle äußert sich auch im Vorliegen verschiedener über die Raumgruppensymmetrie hinausgehender nichtkristallographischer Pseudosymmetrieelemente, durch die sich die unabhängigen Moleküle näherungsweise ineinander überführen lassen. Entlang den zweizähligen Schraubenachsen der Raumgruppe parallel zur c-Achse sind es lokale vierzählige Schraubenachsen, durch die alle vier Moleküle recht gut auseinander erzeugt werden können. Zusätzlich lassen sich Moleküle gleicher Orientierung durch weitere lokale zweizählige Schraubenachsen ebenfalls parallel zur c-Achse ineinander überführen (Abb. 3.3).

Während es sich bei diesen zwei- und vierzähligen Schraubenachsen um Pseudosymmetrieelemente von lokalem Einfluß handelt, die also nur in bestimmten Bereichen als solche wirksam sind,

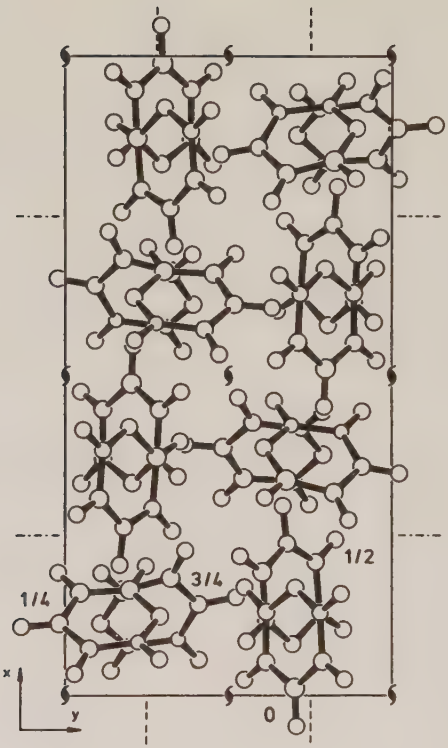


Abb. 3.3 Elementarzelle des Pyridins mit Blickrichtung entlang der positiven c-Achse. Wieder sind die vier unabhängigen Moleküle gekennzeichnet, diesmal durch Angabe der z-Koordinaten ihrer Ringmittelpunkte, die recht gut bei n/4 mit n = 1,2,3,4 liegen. Die im Text erwähnten lokalen zweizähligen Schraubenachsen verlaufen parallel zur c-Achse jeweils durch sich in dieser Projektion überlappende Moleküle.

liegen noch andere nichtkristallographische Symmetrieelemente vor, die - allerdings weniger gut - für die gesamte Struktur gelten. Bei exakter Erfüllung läge die zentrosymmetrische Raumgruppe P naa (konventionelle Aufstellung P ccn) vor mit gleich großen Gitterkonstanten, dem Ursprung in 1/4 0 1/4 und als asymmetrischer Einheit einem Molekül in allgemeiner Lage und den Hälften von zwei weiteren Molekülen auf nunmehr ebenfalls vorhandenen zweizähligen Drehachsen parallel zur a-Achse. Die Atomkoordinaten weichen jedoch bis zu 100 pm von den zur Erfüllung dieser höhersymmetrischen Raumgruppe erforderlichen ab; und zwar sind es hauptsächlich die y-Koordinaten, die so verschoben werden müßten, daß die Ringmittelpunkte nun genauer auf y = 1/4 bzw. 3/4 lägen. Bei Verschiebung der Moleküle in diesem Sinne gingen aber die oben erwähnten lokalen vierzähligen Schraubenachsen verloren. In der tatsächlichen Kristallstruktur wird also eine höhere lokale auf Kosten einer höheren kristallographischen Symmetrie verwirklicht.

Die Kristallstruktur zeigt damit keine Ähnlichkeit mit denen des Benzols (Bacon et al., 1964; Fourme et al., 1971) oder einiger Di-, Tri- und Tetrazine ähnlicher Molekülstruktur (Wheatley, 1954, 1956, 1959; Bertinotti et al., 1956), die alle in kleinen Elementarzellen mit maximal einem Molekül in der asymmetrischen Einheit kristallisieren.

Um zu untersuchen, ob die Phase mit der hier bestimmten Kristallstruktur mit einer der beiden von Biswas gefundenen Phasen identisch ist, wurden mit der Simon-Guinier-Technik Pulverdiagramme aufgenommen. Biswas konnte die von ihm aufgenommenen Diagramme unter Zugrundelegung eines etwa halb so großen Zellvolumens wie hier gefunden indizieren. Ein Vergleich seiner d-Werte mit einem bei -175°C aufgenommenen Diagramm ergab keine Übereinstimmungen. Bei langsamem Abkühlen und Aufheizen der Probe ließ sich keine Phasenumwandlung beobachten. Die Ergebnisse von Biswas konnten also nicht bestätigt werden. Andererseits läßt der Vergleich (Abb. 3.4) des bei -80°C erhaltenen Pulverdiagramms mit dem aus den Ergebnissen der Einkri-

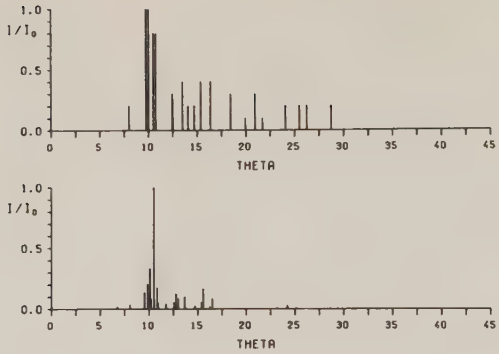
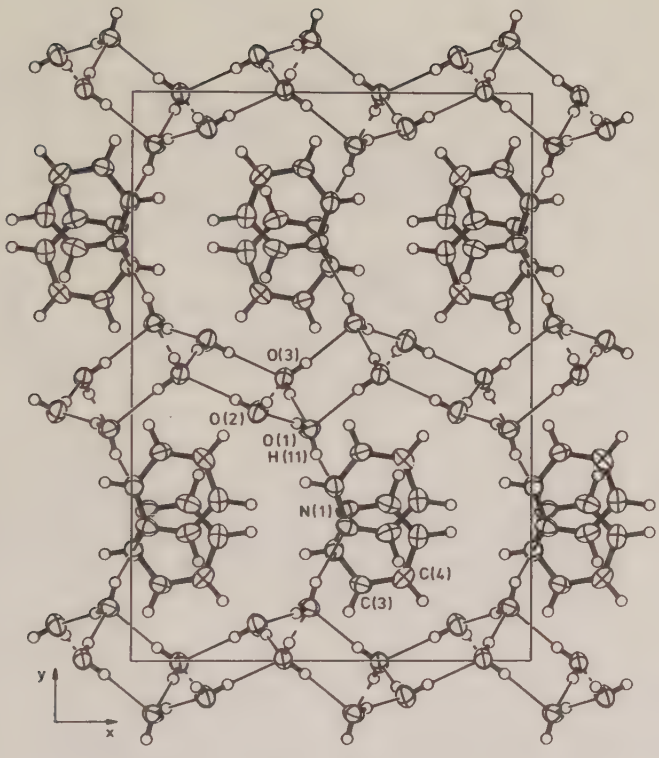


Abb. 3.4 Bei -80°C beobachtetes Pulverdiagramm des Pyridins (oben) und das aus den Ergebnissen der Strukturanalyse am Einkristall berechnete Pulverdiagramm (unten).

stallstrukturanalyse offen, ob Pulver und Einkristall derselben Phase angehören.

Pyridin-Trihydrat

Die Struktur des Trihydrates ist aus zweidimensional-unendlichen, gebuckelten Schichten aus durch Wasserstoffbrücken vernetzten Wassermolekülen mit zwischen den Schichten eingelagerten Pyridinmolekülen aufgebaut (Abb. 3.5). Das Pyridinmolekül ist über eine aus den Wasserschichten herausführende Wasserstoffbrücke O-H...N mit dem Sauerstoffatom O(1) verknüpft. Die fünf anderen Protonen der drei unabhängigen Wassermoleküle nehmen feste Positionen in fünf geometrisch unterschiedlichen Wasserstoffbrücken in der Wasserschicht ein. Eine Wasserschicht besteht aus je n Vier- und Sechsringen und 2n Fünfringen und ist in Abb. 3.6 gezeigt. Die Längen der O-H...O-Wasserstoffbrücken entsprechen mit 275.0 bis 284.3 pm etwa denjenigen im Eis (276 pm) und in Clathrat-Hydraten (Jeffrey, McMullan, 1967).



O(1) - H(11) : 81(6) pm H(11) - O(1) - H(12) : 106(6)°

O(1) - N(1) : 279.2(4) O(1) - H(11) - N(1) : 163(5)

Abb. 3.5 Elementarzelle des Pyridin-Trihydrates in c-Achsenprojektion. Die Ellipsoide geben wie in Abb. 3.6 den Bereich 50%iger Aufenthaltswahrscheinlichkeit an. Beschriftet sind einige Atome der asymmetrischen Einheit der Tab. 3.3; nur das Atom O(3) befindet sich in der Lage x, y, z - 1.

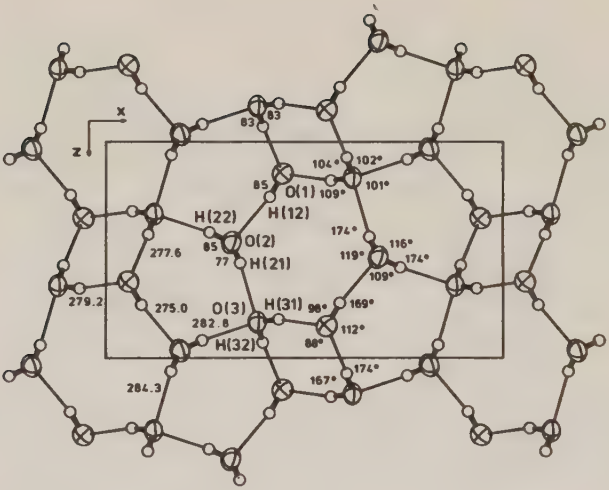


Abb. 3.6 Pyridin-Trihydrat: Blick gegen die positive b-Achse auf die Wasserschicht um y = 1/4 mit Bindungslängen [pm] und Bindungswinkeln. Die geschätzten Standardabweichungen betragen 6-7 pm für Abstände O-H, 0.4-0.5 pm für Abstände O...O sowie 5-6° für Winkel H-O-H und O-H...O.

Über Wasserstoffbrücken des Typs O-H...N finden sich verhältnismäßig wenige Angaben in der Literatur; die hier vorliegende entspricht mit ihrer Länge von 279.2 pm derjenigen im Piperazin-Hexahydrat (278.6 pm; Schwarzenbach, 1968). Mit Winkeln an den Wasserstoffatomen von 163° bis 174° bei geschätzten Standardabweichungen um 6° sind alle Wasserstoffbrückenbindungen weitgehend gestreckt. Von den drei Sauerstoffatomen ist O(1) an vier Wasserstoffbrücken beteiligt (davon drei innerhalb der Wasserschicht), O(3) ebenfalls an vier und O(2) nur an drei. Die Atome O(1) und O(2) lassen sich als Ecken, die an ihnen zusammenstoßenden Ringe als Flächen von durch H_2O-Moleküle aufgespannten Polyedern auffassen, wie sie in Clathrathydraten vorliegen (Jeffrey, McMullan, 1967). In solchen

konvexen Polyedern können jedoch keine Ecken auftreten, an denen vier Flächen auf die Art aneinanderstoßen wie die vier Ringe am Atom O(3).

Die Bindungslängen und Bindungswinkel innerhalb des Pyridinmoleküls zeigen keine Besonderheiten; sie sind in Tab. 3.5 zusammengestellt. Die Werte sind erheblich genauer als die für das Pyridin selber gefundenen und stimmen im Rahmen der Standardabweichungen mit den dort berechneten Mittelwerten überein. Im Trihydrat behält das Pyridinmolekül innerhalb der Fehlergrenzen seine C_{2v}-Symmetrie.

Tab. 3.5 Pyridin-Trihydrat: Bindungswinkel und Bindungslängen [pm] im Pyridin-Molekül

N(1)-C(2)	133.3(6)	C(6)-N(1)-C(2)	115.9(4)°
C(2)-C(3)	137.0(6)	N(1)-C(2)-C(3)	124.1(4)
C(3)-C(4)	137.0(6)	C(2)-C(3)-C(4)	118.7(4)
C(4)-C(5)	137.5(6)	C(3)-C(4)-C(5)	119.0(4)
C(5)-C(6)	136.8(6)	C(4)-C(5)-C(6)	118.3(4)
C(6)-N(1)	134.4(6)	C(5)-C(6)-N(1)	124.1(4)

Die Pyridinmoleküle sind so in Stapeln zwischen den Wasserschichten angeordnet, daß jedes von ihnen sechs andere als nächste Nachbarn besitzt, zu denen die kürzesten Abstände um 270 pm (für Kontakte zwischen Wasserstoffatomen) liegen. Die Abstände zwischen Wasserstoffatomen am Aromaten und solchen in den beiden benachbarten Wasserschichten betragen 244 bis 292 pm; die Pyridinmoleküle sind einseitig in Vertiefungen in den Wasserschichten eingebettet, und zwar am meisten mit den CH-Gruppen der Atome C(3) und C(4).

Zweidimensionale Netze nur aus Wassermolekülen wurden auch in den eng miteinander verwandten Kristallstrukturen der Hexahydrate von Piperazin (Schwarzenbach, 1968) und Pinakol (Kim, Jeffrey, 1970) gefunden. Diese Wasserschichten sind jedoch ausschließlich aus Fünfringen aufgebaut, von denen sich hier

jeweils vier miteinander kondensierte als "Dach" eines Pentagondodekaeders auffassen lassen. Zudem verknüpft hier jede Amino- bzw. Hydroxy-Funktion der bifunktionellen organischen Komponente zwei benachbarte Wasserschichten, indem sie als Donator und Akzeptor in zwei Wasserstoffbrücken wirkt. Die hydrophoben Reste sind dadurch vollständig von einem clathrathydratähnlichen System von Wasserstoffbrücken umgeben.

Die Wasserschichten in diesen Hexahydraten zeigen höhere Symmetrie als die im Pyridin-Trihydrat. In einer Schicht treten nur zwei strukturell unterschiedliche Wasserstoffbrücken auf, und jedes Wassermolekül hat mehrere energetisch gleichwertige Anordnungsmöglichkeiten. Tatsächlich sind die Protonen in diesen Strukturen fehlgeordnet, und nur so ist die tetragonale bzw. pseudotetragonale Beschreibung möglich. Im Trihydrat stehen dagegen für die fünf Protonen fünf strukturell unterschiedliche Positionen zur Verfügung, auf denen die Protonen auch lokalisierbar sind. Abb. 3.7 zeigt zum Vergleich die Wasserschichten beider Typen schematisch.

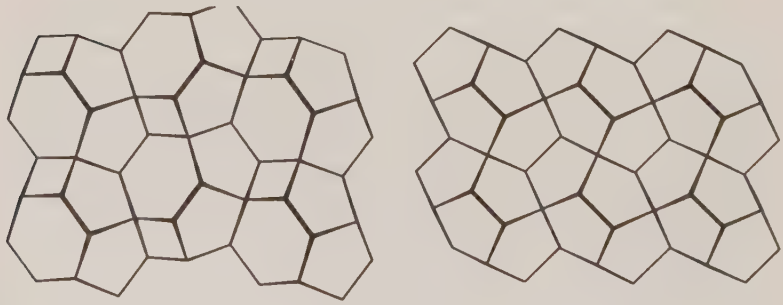
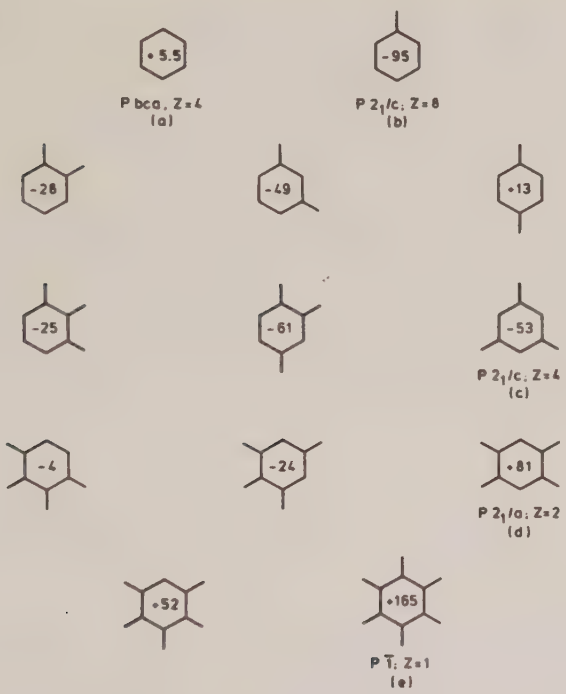


Abb. 3.7 Schematische Darstellung der Wasserschichten in Pyridin-Trihydrat (links) und Piperazin-Hexahydrat (rechts). Jeder Punkt, in dem mehrere Linien (Wasserstoffbrücken) zusammenlaufen, entspricht einem Sauerstoffatom.

4. Die Kristallstrukturen von Mesitylen (1,3,5-Trimethylbenzol) und Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1)

In der Reihe der Methylbenzole werden die Schmelzpunkte und Schmelzenthalpien in ausgeprägter Weise durch Anzahl und Stellung der Methylsubstituenten bestimmt (Tab. 4.1). Die Verbindungen mit den sechs höchsten Schmelzpunkten haben alle eine gerade Anzahl von Methylgruppen; ausgenommen ist das Pentamethylbenzol, das jedoch deutlich niedriger schmilzt als Hexamethylbenzol und 1,2,4,5-Tetramethylbenzol (Durol).



Tab. 4.1 Schmelzpunkte des Benzols und der Methylbenzole mit Angaben zu den Kristallstrukturen, soweit bestimmt. (a): Bacon et al., 1964; (b): Anderson et al., 1977; (c): diese Arbeit; (d): Abovyan et al., 1977; (e): Brockway, Robertson, 1939

Weiterhin sind - wieder mit derselben Ausnahme - die Moleküle mit Schmelzpunkten oberhalb von $0^{o}C$ zentrosymmetrisch. Soweit ihre Kristallstrukturen bekannt sind, besetzen die Moleküle auch im Kristallgitter Inversionszentren in relativ kleinen Elementarzellen. Das Toluol als wenig symmetrisches, offenbar schlecht zu packendes Molekül kristallisiert dagegen mit zwei Molekülen in der asymmetrischen Einheit. Hier sollte nun die Kristallstruktur des Mesitylens bestimmt werden, das trotz hoher Eigensymmetrie ($\bar{6}m2 - D_{3h}$) einen recht niedrigen Schmelzpunkt hat.

Als relativ stark basischer Aromat bildet Mesitylen im Gegensatz zu Benzol mit Halogenwasserstoffen kongruent schmelzende 1:1-Addukte (Maass, Russell, 1918; Cook et al., 1956), die auch in Lösung nachzuweisen sind (Brown, Melchiore, 1965). Auf Grund IR-spektroskopischer Befunde nahm Cook (1956) das Vorliegen von Wasserstoffbrückenbindungen zwischen Halogenid und aromatischem π-Elektronensystem an. In den 1:1-Komplexen von Benzol mit Chlor und Brom (Hassel, Stromme, 1956) und von p-Xylol mit Tetrabrommethan (Strieter, Templeton, 1961) liegen kurze Kontakte zwischen Ringzentren und Halogenatomen vor; hier handelt es sich um EDA-Komplexe. Für das hier untersuchte Addukt zwischen Mesitylen und Bromwasserstoff erschien diese Art der Wechselwirkung ebenfalls möglich.

4.1 Das Schmelzdiagramm Mesitylen - Bromwasserstoff

Für Kristallzucht und Strukturanalyse ist es wichtig zu wissen, ob die interessierende Phase im festen Zustand einen Homogenitätsbereich (Phasenbreite) aufweist. Ist dies der Fall, muß der Kristall aus einer Schmelze mit möglichst stöchiometrischer Zusammensetzung gezogen werden. Bei abweichender Zusammensetzung der Mischung wird sonst im Kristall Fehlordnung erzwungen. Ist die Phasenbreite zu vernachlässigen, lassen sich auch aus Schmelzen, in denen eine Komponente im Überschuss

vorliegt, Kristalle mit stöchiometrischer Zusammensetzung ziehen. Da Maass und Russell (1918) im System Mesitylen-Bromwasserstoff nur die Liquiduslinien registriert hatten, durch die allein eine eventuelle Phasenbreite des Adduktes nicht angezeigt werden kann, wurden von einigen Proben in der Nähe von 1:1-Zusammensetzung mit Differenzthermoanalyse Aufheizkurven aufgenommen.

Proben unterschiedlicher Zusammensetzung aus Mesitylen, das über Natrium getrocknet und destilliert worden war, und Bromwasserstoffgas (durch Hydrolyse von Phosphortribromid dargestellt) wurden in Duranglasampullen eingeschmolzen. Dazu wurden in einer Vakuumapparatur auf bekannte Mengen des Aromaten abgemessene Volumina des Gases aufkondensiert. Die genaue Zusammensetzung der Probe wurde nach der Messung durch argentometrische Bestimmung des Bromidgehaltes mit Eosin als Adsorptionsindikator ermittelt.

Die Messungen ergaben, daß die Verbindung Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1) eine Phasenbreite von maximal etwa 5 Mol-% besitzen kann; innerhalb dieses Bereiches lag kein Meßpunkt; außerhalb wurden die Eutektikalen bei -71°C zur HBr-ärmeren und bei -111° zur HBr-reicheren Seite registriert. Diese Ergebnisse sind mit denen von Maass und Russell (1918) vereinbar, die Eutektika bei etwa -70 und - 109° fanden. Der Schmelzpunkt des kongruent schmelzenden 1:1-Adduktes liegt bei -61°C. Abb. 4.1 zeigt die von Maass und Russell aufgenommene Liquiduskurve und die in dieser Arbeit erhaltenen Messpunkte.

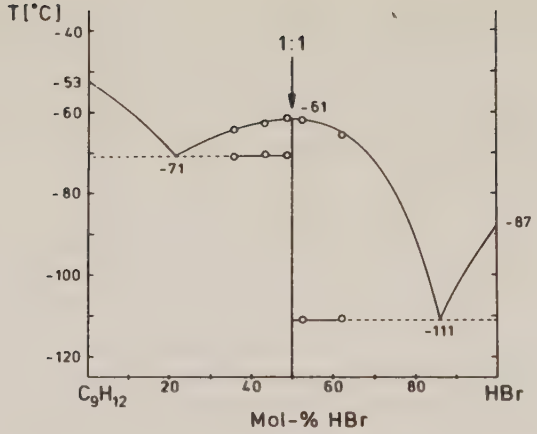


Abb. 4.1 Das Schmelzdiagramm mit der Liquiduskurve von Maass und Russell (1918) und eigenen Messpunkten.

4.2 Strukturbestimmungen

Mesitylen

Die Zucht eines Mesitylen-Einkristalles erfolgte mit der Bridgman-Apparatur bei -102°C; bei derselben Temperatur wurden die Messungen durchgeführt. Dabei ergaben sich die kristallographischen Daten der Tab. 4.2. Achsenaufnahmen führten zur Lauegruppe 2/m; mit den systematischen Auslöschungen

h 0 l nur vorhanden für l = 2n
0 k 0 nur vorhanden für k = 2n

steht eindeutig die Raumgruppe $P\,2_1/c$ fest. In dem erforderlichen Viertel der Beugungskugel wurden bis $2\theta = 60°$ 2284 unabhängige Reflexintensitäten gemessen, von denen 1278 als signifikant eingestuft wurden.

Die Lösung des Phasenproblems erfolgte mit direkten Methoden. In einer E-map ließen sich alle neun Kohlenstoffatome lokali-

Tab. 4.2 Kristallographische Daten und Angaben zu Datensammeln und Strukturbestimmung von Mesitylen und Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1).

	C_9H_{12}	$C_9H_{12}.HBr$
Meßtemperatur [°C]	-102	-118
Gitterkonstanten	a= 864.1(11)pm b=1355.3(6) c= 767.0(6) α= 90° β= 118.72(7) γ= 90	827.2(4)pm × 833.0(4) 772.0(4) 113.67(4)° 92.73(3) 89.09(4)
Volumen [$10^{-6}pm^3$]	787.7(12)	486.6(4)
Raumgruppe; Z	P $2_1/c$; 4	P $\bar{1}$; 2
Ber. Dichte [Mg/m^3]	1.01	1.37
$2\theta_{max}$	60°	60°
Zahl der Reflexe; davon beobachtet	2284; 1278	2848; 1569
R; R_w	0.084; 0.111	0.079; 0.082
R'; R_w'	0.137; 0.117	0.135; 0.093

× Durch Anwendung der Transformationsmatrix (0 0 1/$\bar{1}$ 0 0/0 $\bar{1}$ 0) auf die Achsen läßt sich die reduzierte Zelle gemäß den International Tables (1969) erhalten.

sieren. Nach Verfeinerung ihrer Koordinaten und anisotropen thermischen Parameter konnten in einer Differenz-Fouriersynthese vernünftige Koordinaten für alle Wasserstoffatome gefunden werden. Ihre Mitverfeinerung (mit isotropen B-Werten) führte jedoch zu unbefriedigender Konvergenz und ergab bei zum Teil sehr hohen B-Werten unvernünftige Bindungslängen auch der Kohlenstoffatome untereinander. Bei der abschließenden Verfeinerung wurden daher die ursprünglich gefundenen Koordinaten sowie B-Werte von $4\times10^4pm^2$ fixiert gehalten. Diese Verfeinerung konvergierte bei einem R-Wert von 0.084. Die abschließenden Parameter enthält Tab. 4.3.

Tab. 4.3 Mesitylen: Abschließende Ortsparameter und B_{ij}-Werte [$10^4 pm^2$]. Die Koordinaten der Wasserstoffatome waren fixiert und sind deshalb ohne Standardabweichungen angegeben, die bei ca. 3 pm liegen dürften. Die isotropen B-Werte aller Wasserstoffatome wurden bei $4 \times 10^4 pm^2$ fixiert gehalten. Alle Atome befinden sich in der allgemeinen Lage (4e) der Raumgruppe P $2_1/c$.

Atom	x	y	z
C(1)	-0.0176(4)	0.1491(3)	0.1815(4)
C(2)	0.0581(4)	0.0612(2)	0.2804(4)
C(3)	0.2222(4)	0.0606(2)	0.4510(4)
C(4)	0.3081(4)	0.1504(3)	0.5211(4)
C(5)	0.2351(4)	0.2386(2)	0.4263(4)
C(6)	0.0710(4)	0.2364(2)	0.2554(4)
C(7)	-0.1957(4)	0.1501(3)	-0.0059(5)
C(8)	0.3026(5)	-0.0344(3)	0.5543(5)
C(9)	0.3289(5)	0.3366(3)	0.5105(5)
H(2)	0.001	0.007	0.218
H(4)	0.421	0.157	0.641
H(6)	0.023	0.304	0.190
H(71)	-0.193	0.190	-0.106
H(72)	-0.241	0.081	-0.043
H(73)	-0.303	0.164	0.031
H(81)	0.344	-0.094	0.491
H(82)	0.237	-0.056	0.612
H(83)	0.423	-0.012	0.652
H(91)	0.304	0.385	0.403
H(92)	0.277	0.366	0.603
H(93)	0.477	0.342	0.582

	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
C(1)	2.6(1)	4.5(2)	2.7(1)	0.0(1)	1.2(1)	-0.2(1)
C(2)	3.5(1)	2.7(1)	3.7(1)	-0.4(1)	1.7(1)	-0.4(1)
C(3)	3.2(1)	3.3(2)	3.1(1)	0.6(1)	1.7(1)	0.5(1)
C(4)	2.7(1)	5.1(2)	2.4(1)	-0.2(1)	1.4(1)	-0.5(1)
C(5)	3.4(1)	3.5(2)	2.9(1)	-0.3(1)	2.0(1)	-0.4(1)
C(6)	2.9(1)	3.4(1)	3.0(1)	0.4(1)	1.6(1)	0.2(1)
C(7)	3.1(1)	6.2(2)	3.6(1)	-0.6(2)	0.7(1)	0.3(2)
C(8)	4.4(2)	5.1(2)	5.0(2)	1.2(2)	2.5(2)	1.1(2)
C(9)	4.7(2)	4.0(2)	4.3(2)	-1.4(1)	2.5(1)	-1.3(1)

Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1)

Beim Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1) wurde die Probenzubereitung durch den bei Raumtemperatur beträchtlichen Dampfdruck

des Gases über Mesitylen erschwert. Das Abfüllen vorher präparierter Proben in Markröhrchen erwies sich als nicht praktikabel. Daher wurde direkt im Markröhrchen Mesitylen vorgelegt und unter Vakuum Bromwasserstoff aufkondensiert, dessen Menge unter Berücksichtigung der Dichten beider Komponenten im festen Zustand abgeschätzt wurde. Aus einer so hergestellten Probe konnte unter Verwendung der Heizwendel ein Einkristall erhalten werden, der bei -118°C vermessen wurde und die kristallographischen Daten der Tab. 4.2 ergab. Die geringen Abweichungen zweier Winkel von 90° ließen zunächst an das monokline Kristallsystem denken, Achsenaufnahmen führten jedoch zur Lauegruppe $\bar{1}$, also dem triklinen System. Die Raumgruppe P $\bar{1}$ ergab sich durch die vollständige Strukturbestimmung. In der Hälfte der Beugungskugel wurden 2848 unabhängige Reflexe vermessen, von denen 1569 als beobachtet eingestuft wurden.

Die Struktur wurde mit Hilfe der Pattersonfunktion gelöst. Diese läßt sich als Fourierreihe mit den Quadraten der beobachteten Strukturamplituden als Koeffizienten berechnen. Ihre Maxima können als Vektoren zwischen Stellen hoher Elektronendichten in der Elementarzelle interpretiert werden. Im vorliegenden Fall wurde das höchste Maximum der Pattersonfunktion dem Vektor zwischen zwei Bromatomen zugeordnet, die in der Raumgruppe P $\bar{1}$ über das Symmetriezentrum einander äquivalent sind. Eine mit den so bestimmten Koordinaten des unabhängigen Bromatoms phasierte Fouriersynthese der Elektronendichte ergab die Koordinaten aller neun Kohlenstoffatome. Nach anisotroper Verfeinerung aller Nichtwasserstoffatome konnten einer Differenz-Fouriersynthese vernünftige Koordinaten für alle Wasserstoffatome bis auf dasjenige am Bromatom entnommen werden. Die Lokalisierung von Protonen in der Nachbarschaft schwerer Atome wie Brom ist mit Röntgenbeugungsmethoden prinzipiell nur in besonders günstigen Fällen möglich. Hier blieb die Lage des Protons unbestimmbar. Um in der abschließenden Verfeinerung Konvergenz zu erreichen, mußten alle Wasserstoffparameter fixiert gehalten werden (isotrope

Tab. 4.4 Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1): Abschließende Ortsparameter und B_{ij}-Werte $[10^4 pm^2]$. Die Koordinaten der Wasserstoffatome waren fixiert und sind deshalb ohne Standardabweichungen (ca. 5 pm) angegeben. Die isotropen B-Werte aller Wasserstoffatome wurden bei $5 \times 10^4 pm^2$ fixiert gehalten. Alle Atome besetzen die allgemeine Lage (2i) der Raumgruppe P $\bar{1}$.

Atom	x	y	z
Br	0.8165(1)	0.0966(1)	0.4001(1)
C(1)	0.6895(9)	0.4920(9)	0.2367(11)
C(2)	0.6259(9)	0.3391(10)	0.0927(11)
C(3)	0.7281(10)	0.2100(9)	-0.0194(11)
C(4)	0.8936(10)	0.2323(10)	0.0082(12)
C(5)	0.9613(9)	0.3823(10)	0.1491(12)
C(6)	0.8595(9)	0.5136(10)	0.2654(11)
C(7)	0.5796(10)	0.6349(10)	0.3625(12)
C(8)	0.6543(13)	0.0391(11)	-0.1731(13)
C(9)	1.1442(9)	0.4079(12)	0.1800(14)
H(2)	0.502	0.345	0.073
H(4)	0.955	0.146	-0.061
H(6)	0.921	0.634	0.361
H(71)	0.600	0.714	0.387
H(72)	0.506	0.601	0.330
H(73)	0.555	0.615	0.514
H(81)	0.640	-0.054	-0.103
H(82)	0.724	-0.009	-0.276
H(83)	0.552	0.062	-0.220
H(91)	1.194	0.355	0.084
H(92)	1.181	0.369	0.275
H(93)	1.168	0.529	0.224

	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
Br	4.54(5)	4.82(5)	4.73(5)	0.55(3)	0.79(3)	2.60(4)
C(1)	2.3(3)	2.8(3)	3.4(4)	0.2(3)	0.4(3)	1.4(3)
C(2)	2.5(3)	2.9(3)	3.5(4)	-0.8(3)	-0.3(3)	1.1(3)
C(3)	4.0(4)	2.3(3)	2.8(4)	-1.1(3)	0.0(3)	1.1(3)
C(4)	3.3(4)	3.5(4)	3.5(4)	0.9(3)	0.5(3)	2.0(3)
C(5)	2.5(3)	3.7(4)	3.9(4)	0.2(3)	0.0(3)	2.2(3)
C(6)	1.9(3)	3.8(4)	3.6(4)	0.1(3)	0.1(3)	1.9(3)
C(7)	2.8(4)	2.7(3)	4.6(5)	0.4(3)	0.4(3)	0.3(3)
C(8)	6.6(6)	3.0(4)	4.2(5)	-1.2(4)	-0.1(4)	0.6(4)
C(9)	1.6(3)	6.2(5)	6.0(5)	0.8(3)	0.3(3)	3.3(4)

B-Werte von $5\times10^4 pm^2$). Bewichtet wurde hier gemäß dem Schema $1/w = \sigma(F)^2 + (0.03\ F_o)^2$, wodurch den stärksten Reflexen ein niedrigeres Gewicht zugeteilt wurde. Der abschließende R-Wert lag bei 0.079. Die endgültigen Parameter sind in Tab. 4.4 enthalten.

4.3 Beschreibung der Strukturen

Abb. 4.2 zeigt das unabhängige Molekül bzw. die Formeleinheit beider Strukturen mit atomaren Schwingungsellipsoiden. Tab. 4.5 enthält Bindungslängen und Bindungswinkel. Das Gerüst des Aromaten ist in beiden Strukturen im Rahmen der Fehlergrenzen identisch. In der genauer bestimmten Struktur des Mesitylens sind die C-C-Bindungen im Ring im Mittel 139.2 pm lang, die zu den Methylgruppen 151.4 pm. Diese Werte stimmen gut mit den in den anderen Methylaromaten der Tab. 4.1 gefundenen überein.

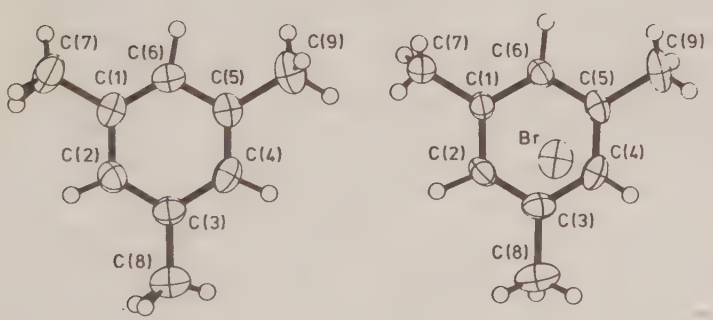


Abb. 4.2 Die Moleküle bzw. Formeleinheiten von Mesitylen und Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1). Das Bromatom liegt 360 pm oberhalb der Ringebene. In allen Abbildungen dieses Kapitels umhüllen die Ellipsoide die Bereiche 50%-iger Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

Tab. 4.5 Bindungslängen und Bindungswinkel in Mesitylen und Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1). Für Mesitylen sind zusätzlich die Mittelwerte chemisch äquivalenter Abstände und Winkel angegeben (unterstrichen).

	C_9H_{12}		$C_9H_{12}.HBr$
C(1) - C(2)	139.5(5) pm		139(1) pm
C(2) - C(3)	139.3(5)		140(1)
C(3) - C(4)	139.2(5)	139.2	138(1)
C(4) - C(5)	138.4(5)		138(1)
C(5) - C(6)	139.4(5)		139(1)
C(6) - C(1)	139.4(5)		141(1)
C(1) - C(7)	151.9(4)		149(1)
C(3) - C(8)	149.6(5)	151.4	150(1)
C(5) - C(9)	152.8(5)		151(1)
C(6) - C(1) - C(2)	119.2(3)°		118.4(6)°
C(2) - C(3) - C(4)	118.1(3)	118.6	117.7(7)
C(4) - C(5) - C(6)	118.5(3)		119.0(7)
C(1) - C(2) - C(3)	121.1(3)		122.1(7)
C(3) - C(4) - C(5)	121.9(3)	121.4	122.6(7)
C(5) - C(6) - C(1)	121.3(3)		120.2(7)
C(7) - C(1) - C(2)	121.2(3)		122.5(6)
C(7) - C(1) - C(6)	119.5(3)		119.2(7)
C(8) - C(3) - C(2)	120.5(3)		120.3(7)
C(8) - C(3) - C(4)	121.5(3)	120.7	122.0(7)
C(9) - C(5) - C(4)	120.9(3)		122.1(7)
C(9) - C(5) - C(6)	120.6(3)		118.9(7)
Abstände C - H	89 - 113 pm		64 - 128 pm
Winkel H - C - H, C - C - H			
am Aromaten	115 - 123°		112 - 125°
in Methylgruppen	89 - 125		87 - 122

Im Mesitylen sind die endozyklischen Winkel an den methylsubstituierten Kohlenstoffatomen im Mittel mit 118.6° signifikant kleiner als die an den anderen mit 121.4°; ähnliches gilt im Mesitylen-Molekül des Adduktes. Dieser Effekt wurde auch in Durol und Toluol beobachtet und ist vermutlich auf sterische Wechselwirkungen zwischen Wasserstoffatomen am Ring und in den Methylgruppen zurückzuführen. Beide Ringe sind im Rahmen der Fehlergrenzen planar. Jeweils eine Methylgruppe - C(9)

im Mesitylen und C(8) im Addukt - ist um etwa 5 pm und damit signifikant aus der Ringebene gerückt.

Im Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1) läßt sich jedem Molekül des Aromaten ein Molekül Bromwasserstoff zuordnen; das Bromatom liegt 360 pm oberhalb der Ringebene deutlich abseits der Normalen durch das Ringzentrum. Das nächste Kohlenstoffatom ist das nicht methylsubstituierte C(4) mit 372 pm Abstand; C(3) und C(5) sind mit 376 und 386 pm nur wenig weiter entfernt. Der Abstand Bromatom - Ringebene entspricht damit der Summe des van der Waals-Radius von Brom (195 pm) und der "halben Dicke" eines Aromaten (170 pm; Pauling, 1973). In den als typische EDA-Komplexe anzusehenden 1:1-Addukten des Benzols mit Brom (Hassel, Stromme, 1956) und mit Tetrabrommethan (Strieter, Templeton, 1961) ist jeweils ein Bromatom in etwa 335 pm Entfernung genau oberhalb des Ringzentrums angeordnet; eine entsprechende CT-Wechselwirkung sollte im hier untersuchten Addukt, falls überhaupt vorhanden, deutlich schwächer sein. Das Vorliegen einer Wasserstoffbrücke zwischen beiden Komponenten kann weder bewiesen noch widerlegt werden; bei einer Anordnung der Längsachse des Bromwasserstoffmoleküls senkrecht zur Ringebene mit dem Wasserstoffatom zwischen Bromatom und Aromaten sollte der Abstand zwischen Ringebene und Bromatom ohne Vorliegen einer Wasserstoffbrücke etwa 416 pm betragen (halbe Dicke des Aromaten - 170 pm - plus van der Waals-Radius des Wasserstoffatoms - 100 pm - plus kovalente Bindungslänge Wasserstoff - Brom von 146 pm). Andererseits erscheint die Ausbildung einer Wasserstoffbrücke auf Grund der großen räumlichen Ausdehnung der Elektronenwolken beider Komponenten wenig wahrscheinlich.

Zur Packung

Mesitylen bildet im kristallinen Zustand eine Schichtstruktur aus (Abb. 4.3). Alle Kohlenstoffatome befinden sich annähernd in Ebenen , die zwischen den Netzebenen ($2\,0\,\bar{2}$) liegen. In diesen Schichten liegt als einziges kristallographisches Symmetrieelement die zweizählige Schraubenachse; als zusätzliches

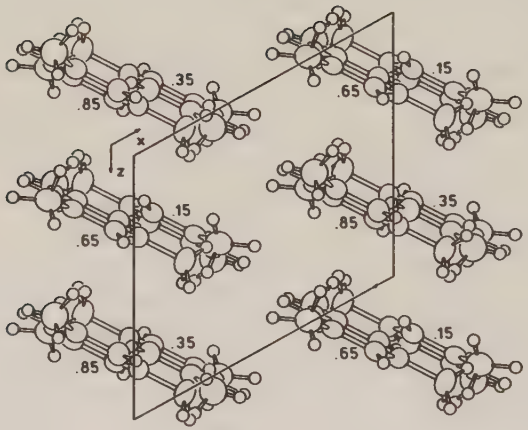


Abb. 4.3 Mesitylen: b-Achsenprojektion der Elementarzelle. Für jedes Molekül ist die ungefähre y-Koordinate des Ringmittelpunktes angegeben.

lokales Symmetrieelement tritt die molekulare Spiegelebene durch die Atome C(1), C(4) und C(7) mit ungefähr gleicher y-Koordinate auf. Jedes Molekül hat innerhalb einer Schicht sechs nächste Nachbarn in 375 bis 420 pm Entfernung (Abstände zwischen Kohlenstoffatomen). Die beiden Nachbarschichten lassen sich durch die kristallographische Gleitspiegelung oder durch Inversion erzeugen. Die Stapelung erfolgt so, daß die Methylgruppe C(9) über der Ringebene eines Moleküls der nächsten Schicht liegt, dessen sechs Ringatome 367.3 bis 414.7 pm entfernt sind; die aromatischen Ringe überdecken sich nirgends (Abb. 4.4). Der kürzeste Abstand zwischen zwei Ring-Kohlenstoffatomen in zwei benachbarten Schichten entspricht mit 345.5 pm gerade der van der Waals'schen Dicke eines Aromaten. Eine ähnliche Schichtstruktur wie das Mesitylen zeigt von den methylierten Aromaten mit bekannter Kristallstruktur nur das Hexamethylbenzol. Hier hat aber jede Schicht fast genau hexa-

gonale Symmetrie, und die Stapelung erfolgt nur translativ. Im Durol sind wie in fast allen anderen festen Aromaten die Ringebenen stärker gegeneinander verkippt.

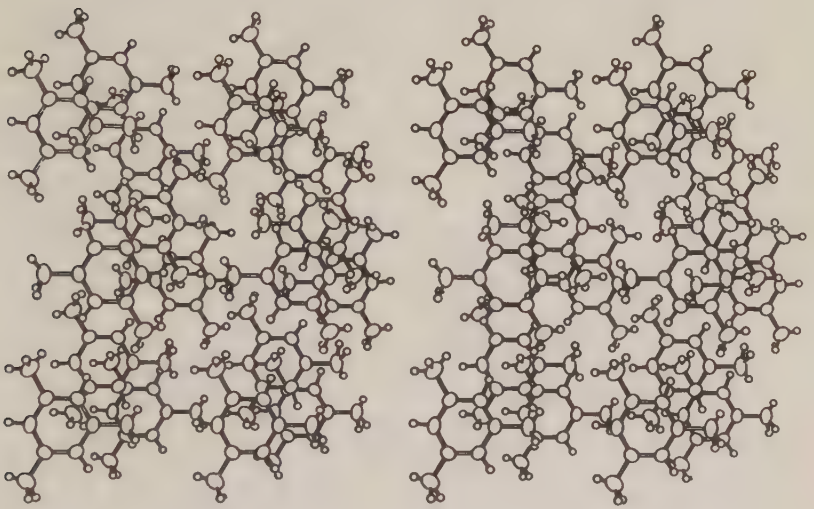


Abb. 4.4 Mesitylen: Stereoskopische Ansicht dreier Schichten mit Blickrichtung senkrecht zu $(2\,0\,\bar{2})$. Die b-Achse verläuft von unten nach oben.

Auch die Packung im Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1) wird durch Schichten bestimmt, in denen alle Nichtwasserstoffatome mit guter Näherung liegen; die Schichten befinden sich hier zwischen den Netzebenen $(0\,2\,\bar{2})$ (Abb. 4.5). Alle Moleküle einer Schicht sind translationsäquivalent; die Symmetriezentren liegen zwischen den Schichten. In der Mitte zwischen jeweils vier Mesitylen-Molekülen liegt in der gleichen Schicht ein Bromatom mit Abständen von 405 bis 420 pm zu diesen vier Molekülen, die untereinander Entfernungen von 388 bis 405 haben. Alle diese

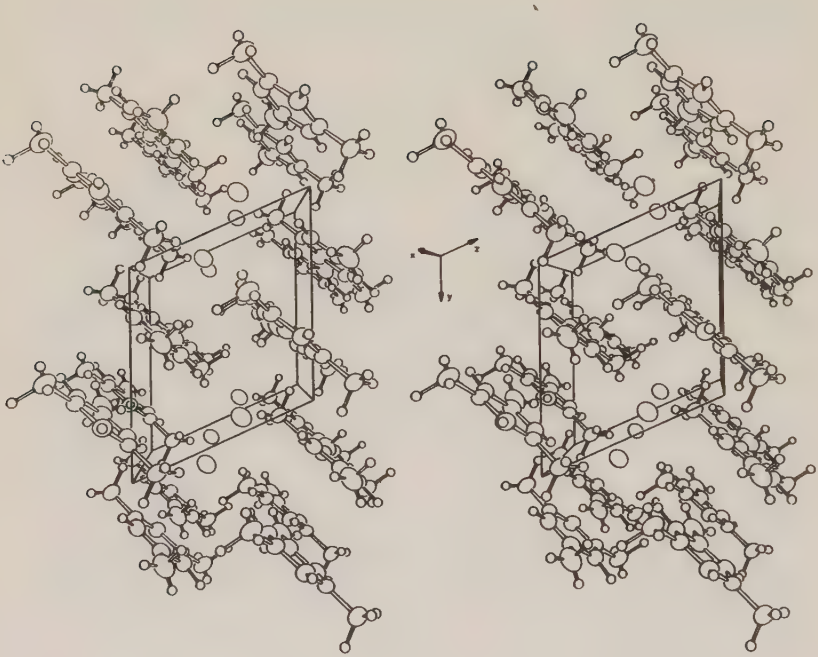


Abb. 4.5 Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1): Die Elementarzelle in a*-Projektion.

Distanzen entsprechen van der Waals'schen Abständen. In einer der beiden Nachbarschichten liegt dem Bromatom das ihm zugeordnete Mesitylen-Molekül am nächsten, in der anderen ein zweites, über die Inversion äquivalentes Bromatom, das 394.7 pm entfernt ist. Der nächstgrößere Brom - Brom-Abstand folgt erst bei 595 pm. Das zweite Bromatom befindet sich in der gleichen Umgebung von fünf Mesitylen-Molekülen in zwei Schichten. Somit sind jeweils zwei Moleküle Bromwasserstoff in einem Hohlraum zwischen insgesamt zehn (1+4+4+1) Mesitylen-Molekülen in vier Schichten angeordnet (Abb. 4.6). Da die Abstände zwischen Koh-

lenstoffatomen in benachbarten Schichten mit Werten von 365 bis 425 pm im Rahmen von van der Waals'schen Kontakten liegen, ist dieser Hohlraum als allseitig geschlossen anzusehen.

Die Art der Packung beider Komponenten im Kristall legt damit die Vermutung nahe, daß es sich bei dem untersuchten Addukt im kristallinen Zustand um einen Gitterkomplex handelt, dessen Komponenten hauptsächlich durch van der Waals'sche Kräfte zusammengehalten werden. Die auffällige Anordnung je eines Moleküls Bromwasserstoff über einem Molekül des Aromaten könnte jedoch auf zusätzliche Einflüsse schwacher Charge-Transfer-Wechselwirkungen und Wasserstoffbrücken zurückzuführen sein.

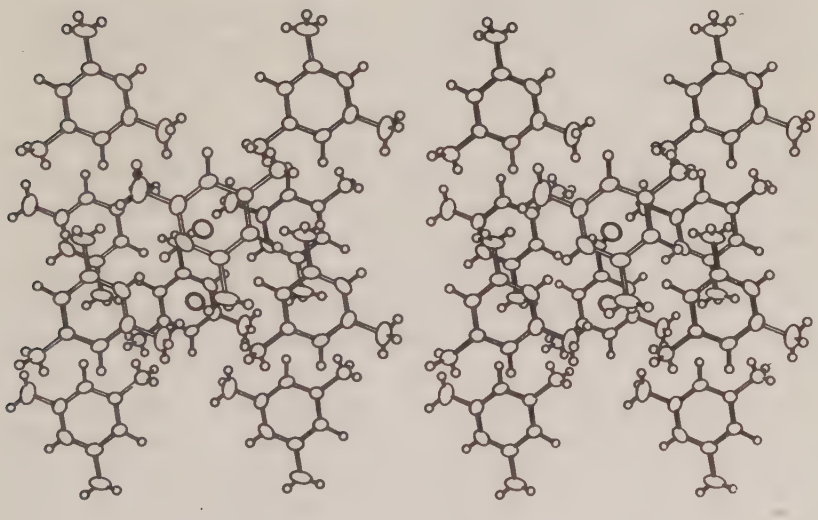


Abb. 4.6 Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1): Zwei Moleküle Bromwasserstoff in dem Hohlraum zwischen zehn Mesitylen-Molekülen (siehe Text). Blickrichtung senkrecht zu $(0\,2\,\bar{2})$.

5. Die Kristallstrukturen der isosteren Verbindungen Acetonitril, Isocyanomethan und Propin

Acetonitril, Isocyanomethan und Propin sind drei Verbindungen mit sehr ähnlicher elektronischer Struktur. Sie besitzen alle eine Dreifachbindung und einen Methylsubstituenten. Das freie Elektronenpaar der Cyano- bzw. Isocyanogruppe ist im Propin durch eine C - H-Bindung ersetzt. Alle drei Moleküle sollten daher ähnliche sterische Ansprüche stellen. In seinen physikalischen Eigenschaften weicht das Propin stark von den beiden anderen Substanzen ab, was zum größten Teil auf das deutlich kleinere Dipolmoment von 0.75 D gegenüber 3.92 und 3.86 D bei Acetonitril und Isocyanomethan (Ghosh et al., 1954) zurückzuführen ist. Diese sind beide unter Normalbedingungen Flüssigkeiten mit Siedepunkten von 82 bzw. 60°, während Propin bei -23°C siedet. Ebenso deutlich weicht der Schmelzpunkt des Kohlenwasserstoffs mit -102°C von denen des Acetonitrils (-44°) und des Isocyanomethans (-45°) ab.

Für festes Acetonitril wurde über Hoch- und Tieftemperaturmodifikationen berichtet (Putnam et al., 1965). Für eine Tieftemperaturmodifikation wurde aus Röntgen-Pulveraufnahmen und IR-Kristallspektren ein Strukturvorschlag abgeleitet (Pace, Noe, 1968). Acetonitril ist auch eine der wenigen Verbindungen, für die eine Röntgenstrukturuntersuchung an der Flüssigphase durchgeführt worden ist (Kratochwill et al., 1973).

Es erschien daher lohnend, die Kristallstruktur des Acetonitrils zu bestimmen, Vergleiche mit den bisher vorliegenden Ergebnissen anzustellen und nach Verwandtschaften mit den Strukturen der beiden anderen Verbindungen zu suchen.

5.1 Strukturbestimmungen

Ein Einkristall von Acetonitril (Uvasol, Merck) wurde bei $-50^{\circ}C$ gezogen. Es mußte relativ dicht unterhalb des Schmelzpunktes gearbeitet werden, da bei -54° eine Phasenumwandlung auftritt (Putnam et al., 1965). Achsenaufnahmen zeigten die Lauegruppe 2/m an ; die systematischen Auslöschungen

h 0 l nur vorhanden für l = 2n

0 k 0 nur vorhanden für k = 2n

legen eindeutig die Raumgruppe P $2_1/c$ fest. Tab. 5.1 enthält die kristallographischen Daten sowie weitere experimentelle Angaben. Der gesammelte Datensatz bestand aus 768 unabhängigen Reflexen, mit $2\theta_{max} = 60^{\circ}$, von denen 433 als beobachtet angesehen wurden. Eine E-map ergab die Koordinaten der drei Nichtwasserstoffatome. Nach ihrer Verfeinerung konnten in einer Differenz-Fouriersynthese auch die drei Wasserstoffatome lokalisiert werden. Die abschließende Verfeinerung (Nichtwasserstoffatome anisotrop, Wasserstoffatome isotrop) ergab bei einem R-Wert von 0.065 die Parameter der Tab. 5.2.

Isocyanomethan wurde nach einer Methode von Schuster et al. (1973) aus N-Methylformamid und p-Toluolsulfochlorid in Chinolin dargestellt. Durch Differenzthermoanalyse und Simon-Guinier-Aufnahmen wurde auch hier eine Phasenumwandlung dicht unterhalb des Schmelzpunktes festgestellt, so daß Kristallzucht und Messung oberhalb der Umwandlungstemperatur von $-55^{\circ}C$ zu erfolgen hatten. Die Verbindung kristalliert rhomboedrisch in der Lauegruppe $\bar{3}m$ mit den hexagonalen Gitterkonstanten der Tabelle 5.1. Die Auslöschungen

h k l nur vorhanden für -h + k + l = 3n

sind mit den rhomboedrischen Raumgruppen R 3m und R $\bar{3}m$ vereinbar. Da die Elementarzelle nur drei Moleküle enthalten kann, wie ein Vergleich der Zellvolumina von Acetonitril und Isocyanomethan ergibt, kommt nur R 3m in Frage, da nur hier das Molekül eine spezielle Lage besetzen kann, deren Punktsymmetrie 3m mit seiner Eigensymmetrie vereinbar ist. Das Molekül behält im Kri-

Tab. 5.1 Kristallographische Daten sowie Angaben zu Datensammlung und Strukturbestimmung von Acetonitril, Isocyanomethan und Propin

		CH_3CN	CH_3NC	CH_3CCH
Meßtemperatur [°C]		-50	-52	-122
Gitterkonstanten	a	409.7(3)	630.5(7)	574.4(3)
	b	825.1(5)	630.5(7)	1601.8(10)
	c	796.7(6)	600.7(4)	1345.2(6)
	ß	100.33(6)°		
Volumen [$10^{-6}pm^3$]		264.8(3)	206.8(4)	1237.6(11)
Raumgruppe; Z		P $2_1/c$; 4	R 3m; 3	P bca; 16
Ber. Dichte [Mg/m^3]		1.03	0.99	0.86
$2\theta_{max}$		60°	60°	60°
Zahl der Reflexe; davon beobachtet		768; 433	85; 76	1305; 721
R; R_w		0.065; 0.069	0.048; 0.071	0.071; 0.082
R'; R_w'		0.121; 0.077	0.052; 0.072	0.135; 0.095

Tab. 5.2 Acetonitril: Koordinaten und thermische Parameter [10^4pm^2]. Alle Atome befinden sich in der allgemeinen Lage (4e) der Raumgruppe P $2_1/c$.

Atom	x	y	z	B(isotrop)
N(1)	0.4549(6)	0.2667(2)	0.4621(3)	
C(2)	0.2953(7)	0.3503(2)	0.3676(3)	
C(3)	0.0933(7)	0.4589(3)	0.2483(3)	
H(31)	-0.100(8)	0.406(3)	0.168(3)	5.6(6)
H(32)	0.239(8)	0.504(4)	0.180(4)	6.9(8)
H(33)	-0.048(9)	0.535(4)	0.309(4)	6.9(8)

Atom	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
N(1)	5.2(1)	3.1(1)	4.5(1)	0.2(1)	0.1(1)	0.3(1)
C(2)	3.5(1)	2.4(1)	3.2(1)	-0.4(1)	0.5(1)	-0.4(1)
C(3)	3.9(1)	3.1(1)	3.8(1)	0.1(1)	0.3(1)	0.4(1)

stall seine volle Symmetrie ($3m - C_{3v}$). Es wurde ein Strukturmodell aufgestellt, in dem das Kohlenstoffatom der Isocyanogruppe in den Ursprung gelegt wurde; für die anderen Nichtwasserstoffatome wurden nach Standardwerten für die kovalenten Radien Lagen auf der polaren c-Achse berechnet. Diese Phasierung erwies sich als richtig. Nach Verfeinerung der unabhängigen Parameter ließ sich das Wasserstoffatom in einer Differenz-Fouriersynthese lokalisieren. Die abschließende Verfeinerung ergab die Parameter der Tab. 5.3 bei einem R-Wert von 0.048 für 76 signifikant beobachtete Reflexe (von insgesamt 85 vermessenen).

Tab. 5.3 Isocyanomethan: Koordinaten und thermische Parameter [10^4pm^2]. Alle Werte, die fixiert oder durch Symmetrie eingeschränkt sind, werden ohne Standardabweichungen angegeben. Das Wasserstoffatom befindet sich in der speziellen Lage (9b), alle anderen Atome in der Lage (3a) der Raumgruppe R 3m.

Atom	x	y	z	B(isotrop)
C(1)	0.0	0.0	0.0	
N(2)	0.0	0.0	0.191(1)	
C(3)	0.0	0.0	0.430(2)	
H(3)	0.082(5)	0.164	0.469(8)	6.3(11)

Atom	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
C(1)	5.6(2)	5.6	4.3(3)	2.8	0.0	0.0
N(2)	3.8(2)	3.8	3.9(2)	1.9	0.0	0.0
C(3)	5.3(4)	5.3	3.7(2)	2.7	0.0	0.0

Propin wurde aus 1-Brom-propen(1) durch Eliminierung von HBr durch KOH in Butanol nach Heisig und Hurd (1933) dargestellt. Ein geeigneter Einkristall wurde bei -122°C erhalten; er zeigte die Gitterkonstanten der Tab. 5.1. Die Lauegruppe ergab sich zu mmm; die systematischen Auslöschungen

0 k l nur vorhanden für k = 2n
h 0 l nur vorhanden für l = 2n
h k 0 nur vorhanden für h = 2n

legen die Raumgruppe P bca fest. Die Elementarzelle des Propins

ist mehr als viermal so groß wie die des Acetonitrils; damit war anzunehmen, daß sie 16 Moleküle enthielt. Die asymmetrische Einheit muß damit aus zwei kristallographisch unabhängigen Molekülen in allgemeinen Lagen bestehen. Der Datensatz bestand aus 1305 unabhängigen Reflexen mit $2\theta_{max} = 60^{o}$, von denen 721 als beobachtet eingestuft wurden. Die Lösung des Phasenproblems erfolgte mit Direktmethoden. Einer E-map ließen sich die Lagen der sechs Kohlenstoffatome entnehmen. Sie wurden mit anisotropen thermischen Parametern verfeinert. Eine anschließende Differenz-Fouriersynthese ergab dann sinnvolle Koordinaten für alle acht Wasserstoffatome, die in die abschließende Verfeinerung mit einbezogen wurden. Dabei ergaben sich die Parameter der Tab. 5.4 bei einem R-Wert von 0.071.

Tab. 5.4 Propin: Koordinaten und thermische Parameter [10^4pm^2]. Alle Atome befinden sich in der allgemeinen Lage (8c) der Raumgruppe P bca.

Atom	x	y	z	B(isotrop)
C(11)	-0.0932(7)	0.4021(2)	0.1309(2)	
C(12)	0.0675(6)	0.4482(2)	0.1280(2)	
C(13)	0.2615(8)	0.5037(3)	0.1269(3)	
C(21)	0.4064(7)	0.2505(2)	0.1434(2)	
C(22)	0.5702(5)	0.2086(2)	0.1278(2)	
C(23)	0.7732(6)	0.1561(2)	0.1103(2)	
H(11)	-0.227(8)	0.365(3)	0.120(3)	10(1)
H(131)	0.347(7)	0.501(2)	0.188(3)	9(1)
H(132)	0.348(10)	0.502(3)	0.073(4)	15(2)
H(133)	0.220(13)	0.546(4)	0.114(4)	15(3)
H(21)	0.267(6)	0.282(2)	0.160(2)	4(1)
H(231)	0.893(7)	0.167(2)	0.166(3)	8(1)
H(232)	0.872(7)	0.176(2)	0.056(3)	8(1)
H(233)	0.735(9)	0.108(3)	0.094(3)	9(1)

Atom	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
C(11)	4.2(2)	3.7(2)	5.5(2)	0.5(2)	0.0(1)	0.2(1)
C(12)	3.8(1)	3.2(1)	3.4(1)	0.6(1)	0.1(1)	0.2(1)
C(13)	4.6(2)	4.3(2)	4.7(1)	-0.5(1)	-0.3(2)	0.1(1)
C(21)	3.9(1)	3.7(2)	5.3(1)	0.1(1)	0.1(1)	0.1(1)
C(22)	3.7(1)	3.0(1)	3.4(1)	-0.8(1)	-0.1(1)	0.2(1)
C(23)	3.8(1)	4.1(2)	4.6(1)	0.3(1)	-0.1(1)	-0.5(1)

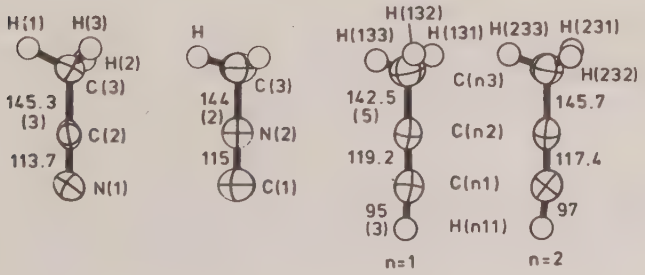
5.2 Diskussion und Vergleich der Strukturen

Für alle drei Verbindungen liegen die Ergebnisse der mikrowellenspektroskopischen Untersuchungen von Costain (1958) vor. Die von ihm erhaltenen Werte für Bindungslängen und Bindungswinkel sind aus methodischen Gründen erheblich genauer als die in dieser Arbeit ermittelten (Abb. 5.1 und Tab. 5.5). Die Unterschiede der C - C-Bindungslängen in beiden unabhängigen Molekülen des Propins sind vermutlich nicht signifikant; für sie konnte keine Erklärung etwa aus Packungseinflüssen abgeleitet werden. Alle Bindungslängen entsprechen den in ähnlichen Substanzen gefundenen Werten und sollen hier nicht weiter diskutiert werden.

In allen drei Kristallstrukturen sind die Moleküle mehr oder weniger exakt in parallelen Schichten angeordnet.

Im Acetonitril (Abb. 5.2) liegen diese Schichten zwischen den Netzebenen $(1\,0\,\bar{2})$ mit d = 310.3 pm. Der Aufbau einer Schicht (Abb. 5.3) ist bestimmt durch die antiparallele Orientierung je zweier über ein Symmetriezentrum äquivalenter Moleküle. Die Abstände des Stickstoffatoms zu beiden Kohlenstoffatomen des anderen Moleküls sind dabei mit 351.8 und 351.3 pm praktisch gleich groß. Die weitere Anordnung dieser Molekülpaare

Abb. 5.1 Die unabhängigen Moleküle in den Kristallstrukturen von Acetonitril, Isocyanomethan und Propin mit den wichtigsten Bindungslängen. Alle anderen Bindungslängen und Bindungswinkel sind in Tab. 5.5 enthalten.



Tab. 5.5 Bindungslängen, soweit nicht in Abb. 5.1 enthalten, und Bindungswinkel.

Acetonitril		Isocyanomethan	
C(3) - H(1)	102(3) pm	C(3) - H	93(4) pm
C(3) - H(2)	96(3)		
C(3) - H(3)	103(3)		
N(1) - C(2) - C(3)	179.2(3)°		
C(2) - C(3) - H(1)	116(2)	N(2) - C(3) - H	105(2)°
C(2) - C(3) - H(2)	106(2)		
C(2) - C(3) - H(3)	112(2)		
H(1) - C(3) - H(2)	107(3)	H - C(3) - H	114(3)
H(1) - C(3) - H(3)	97(2)		
H(2) - C(3) - H(3)	119(3)		

Propin

	n = 1	n = 2
C(n3) - H(n31)	96(4) pm	103(4) pm
C(n3) - H(n32)	89(6)	98(4)
C(n3) - H(n33)	74(4)	82(5)
H(n11) - C(n1) - C(n2)	169(3)°	176(2)°
C(n1) - C(n2) - C(n3)	178.6(3)	179.0(3)
C(n2) - C(n3) - H(n31)	111(2)	109(2)
C(n2) - C(n3) - H(n32)	115(4)	113(2)
C(n2) - C(n3) - H(n33)	109(5)	111(3)
H(n31) - C(n3) - H(n32)	114(4)	96(3)
H(n31) - C(n3) - H(n33)	115(6)	121(4)
H(n32) - C(n3) - H(n33)	91(6)	105(4)

des anderen Moleküls sind dabei mit 351.8 und 351.3 pm praktisch gleich groß. Die weitere Anordnung dieser Molekülpaare kann durch Rechtecke aus jeweils vier Molekülen beschrieben werden, auf deren Umfang abwechselnd Methyl- und Cyanogruppen liegen und deren lange Seiten durch ein Molekülpaar gebildet werden. In einer Schicht liegen die kristallographischen Inversionszentren und Schraubenachsen, die alle vier symmetrieäquivalenten Moleküle erzeugen. Jedes Molekül hat nur fünf nächste Nachbarn mit C - H- und N - H-Kontakten zwischen 264 und 321 pm. Alle anderen Moleküle in der Schicht sind mehr als 414 pm entfernt. Die Nachbarschichten lassen sich durch Translation parallel [1 0 0] erzeugen. Die Abstände zu den nächsten

Molekülen in diesen Schichten betragen 282 bis 306 pm. Dabei handelt es sich um fünf Moleküle in der zur einen Seite und drei in der zur anderen Seite benachbarten Schicht (Abb. 5.9). In dieser nächsten Umgebung von dreizehn Molekülen tritt die Anordnung von vier zum zentralen Molekül antiparallel gelagerten Molekülen nicht auf, die von Kratochwill et al. (1973) durch Röntgenstrukturbestimmung der Flüssigphase festgestellt wurde.

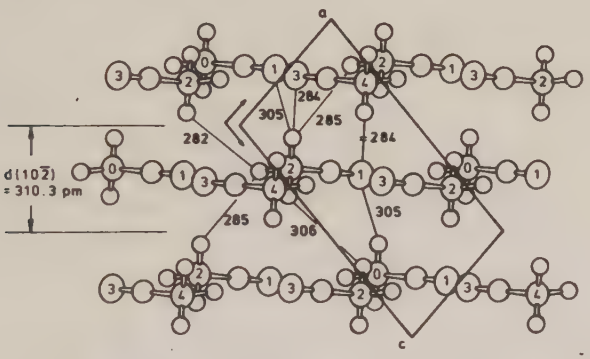


Abb. 5.2 Acetonitril: b-Achsenprojektion der Kristallstruktur. Intermolekulare Abstände, ausgehend vom Molekül der asymmetrischen Einheit, in [pm]. Ziffern n in Atomen geben die ungefähren y-Koordinaten als n/4 an. Durchbrochene Linien deuten an, daß der betreffende Kontakt zu einem translationsäquivalenten Molekül (n/4 + oder - 1) besteht.

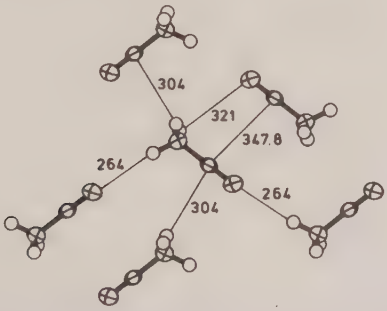


Abb. 5.3 Acetonitril: Moleküle einer Schicht mit intermolekularen Abständen in [pm]. Die positive b-Achse verläuft vertikal von unten nach oben.

Abb. 5.4 läßt für das Isocyanomethan die Schichtung in (1 1 0) erkennen; der Netzebenenabstand beträgt hier 315.3 pm. Alle Moleküle sind translationsäquivalent und liegen parallel zueinander. In einer Schicht (Abb.5.5) hat jedes Molekül sechs nächste Nachbarn in Abständen von 299 bis 331 pm. Mit je vier Nachbarn in den beiden nächsten Schichten, die sich durch Translation entlang dem Basisvektor ($|a_{rh}| = 415.3$ pm) des rhomboedrischen Gitters erzeugen lassen, erreicht jedes Molekül die Koordinationszahl vierzehn (Abb 5.8).

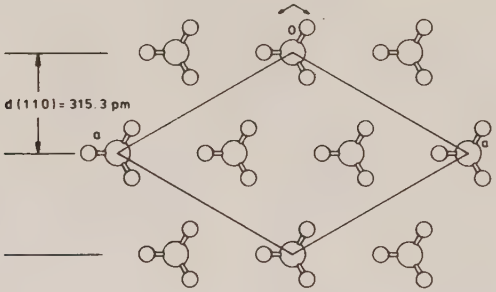


Abb. 5.4 Isocyanomethan: c-Achsenprojektion der Kristallstruktur.

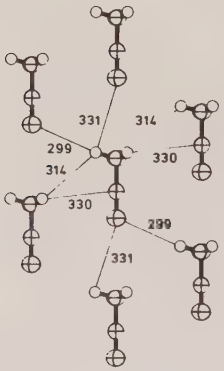


Abb. 5.5 Isocyanomethan: Moleküle einer Schicht mit intermolekularen Abständen [pm]. Die positive c-Achse verläuft vertikal von unten nach oben.

In der Struktur des Propins verlaufen die Schichten zwischen den Netzebenen (0 0 4) im Abstand von 336.3 pm (Abb. 5.6). In einer Schicht wirkt als kristallographisches Symmetrieelement nur die b-Gleitspiegelebene. Durch nichtkristallographische lokale Inversionszentren lassen sich die beiden unabhängigen Moleküle (z. B. im Zentrum von Abb. 5.7) und ihre Umgebungen in der Schicht ineinander überführen. Die Abstände zu den sechs nächsten Nachbarn in der Schicht liegen hier zwischen 277 und 334 pm. Wie im festen Acetonitril liegen auch hier die Längsachsen der Moleküle in zwei unterschiedlichen Orientierungen. Von den beiden Nachbarschichten wird die eine durch kristallographische Inversion, die andere durch die a-Gleitspiegelebene erzeugt. Diese beiden Operationen entsprechen näherungsweise wieder Translationen, wie sie in den beiden anderen Verbindungen gelten, und zwar hier um Kombinationen von $\vec{c}/4$ mit $\vec{a}/2$ oder $\vec{b}/8$.

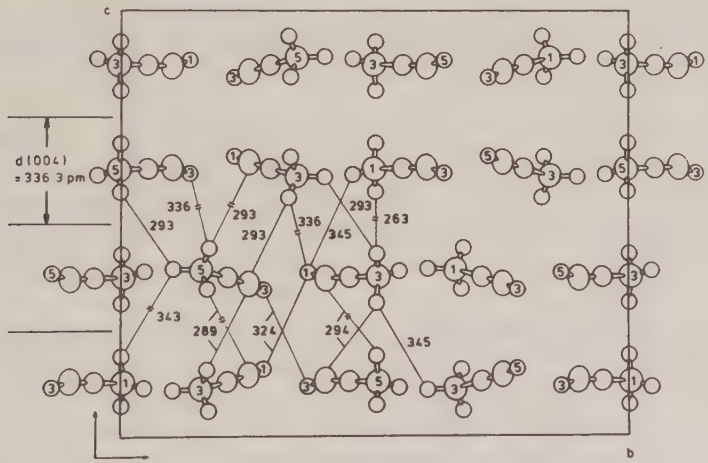


Abb. 5.6 Propin: a-Achsenprojektion der Kristallstruktur mit intermolekularen Abständen [pm]. Ziffern n in Atomen geben die ungefähren x-Koordinaten in n/4 an. Die beiden unabhängigen Moleküle der Tab. 5.4 sind durch römische Ziffern gekennzeichnet.

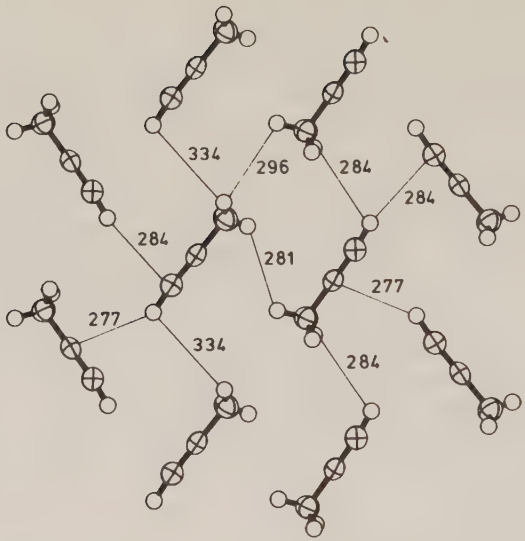


Abb. 5.7 Propin: Moleküle in einer Schicht mit intermolekularen Abständen [pm]. Die positive a-Achse verläuft vertikal von unten nach oben.

Jedes Molekül hat in den beiden Nachbarschichten je vier Nachbarn. Die Umgebung beider unabhängiger Moleküle im Kristall ist etwas unterschiedlich: Von den insgesamt vierzehn nächsten Nachbarn zeigen für das eine Molekül elf, für das andere neun parallele Ausrichtung relativ zum zentralen Molekül (Abb. 5.10).

Eine weitere Möglichkeit des Vergleichs der drei Strukturen bietet sich, wenn man statt der Koordination ganzer Moleküle nur die der beiden Enden aller Moleküle betrachtet. Das erscheint nicht allzu willkürlich, da die intramolekularen Abstände der endständigen Atome voneinander mit ca. 260 bis 360 pm im Bereich auch ihrer intermolekularen van der Waals-Kontakte liegen. Zudem liegen die Koordinaten dieser Atome stets in der Nähe spezieller Werte, was besonders die Abb. 5.2 und 5.6 für Acetonitril und Propin erkennen lassen. Als das eine Molekülende sei im folgenden stets das Methyl-Kohlenstoffatom

angesehen, als das andere je nach Verbindung das endständige N-, C- oder H-Atom.

Bei dieser Betrachtungsweise soll von der rhomboedrischen Elementarzelle des Isocyanomethans ausgegangen werden, wie sie in Abb. 5.8 eingezeichnet ist. Hier liegt die Methylgruppe um etwa 40 pm außerhalb des Zentrums der Zelle, die mit einem Rhomboederwinkel von 98.7° noch näherungsweise als würfelförmig angesehen werden kann und deren Ecken von Isocyano-Kohlenstoffatomen besetzt sind. Entsprechend befinden sich auch diese Atome in einer annähernd würfelförmigen Umgebung von acht Methylgruppen.

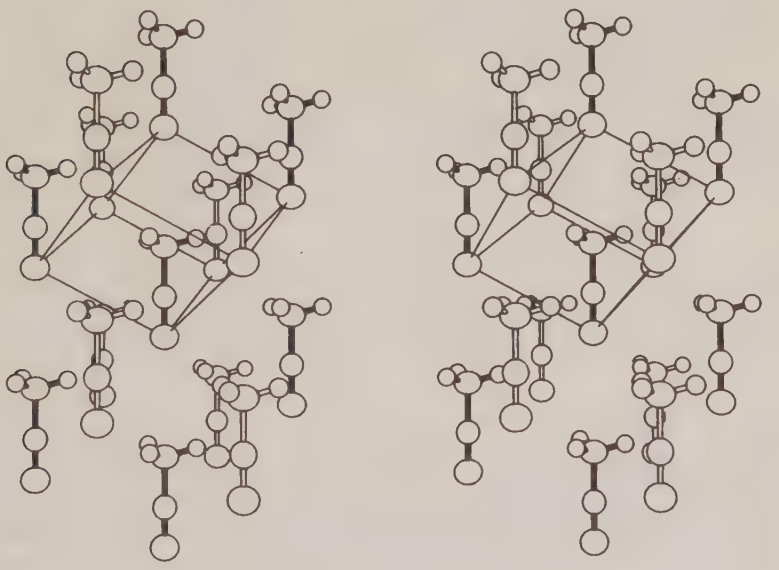


Abb. 5.8 Isocyanomethan: Stereoskopische Ansicht dreier Schichten. Wie in den beiden folgenden Abbildungen sind die Moleküle in der mittleren Schicht stark gezeichnet. Die dünnen Linien als Umrandung der rhomboedrischen Elementarzelle markieren die Umgebung einer Methylgruppe (s. Text).

Im Acetonitril ist jede Methylgruppe in ähnlicher Form von acht Stickstoffatomen umgeben und umgekehrt (Abb. 5.9). Die Lage der Molekülachse auf einer Würfeldiagonalen entspricht der Situation im Isocyanid. Während dort alle Kanten 415 pm lang sind, streuen die entsprechenden Werte im Acetonitril zwischen 390 und 445 pm.

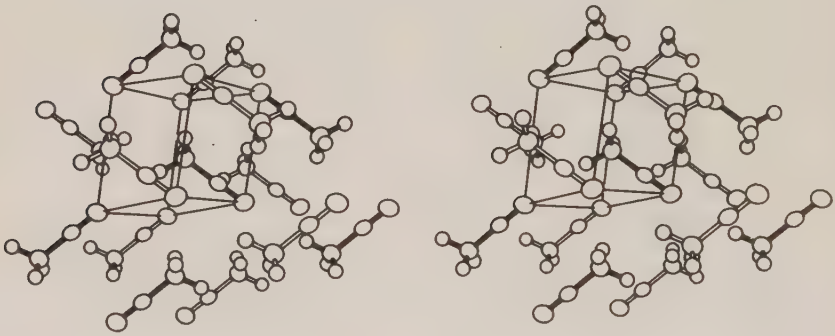


Abb. 5.9 Acetonitril: Stereoskopische Ansicht der Packung dreier Schichten und Umgebung einer Methylgruppe.

Im Propin herrschen kompliziertere Verhältnisse, da hier die Ecken des Würfels um eine Methylgruppe nicht nur von Methylidinprotonen, sondern auch von anderen Methylgruppen besetzt sind (Abb. 5.10). Zudem haben entsprechende Molekülenden beider unabhängiger Moleküle unterschiedliche Umgebungen. Alle Molekülenden lassen sich jedoch auch hier auf Ecken und in Mittelpunkten verzerrter Würfel unterbringen. Die Kanten entlang der b-Achse sind dabei für "Würfel" um Methylgruppen im Schnitt länger als solche um die Acetylen-Wasserstoffatome (458 gegenüber 347 pm).

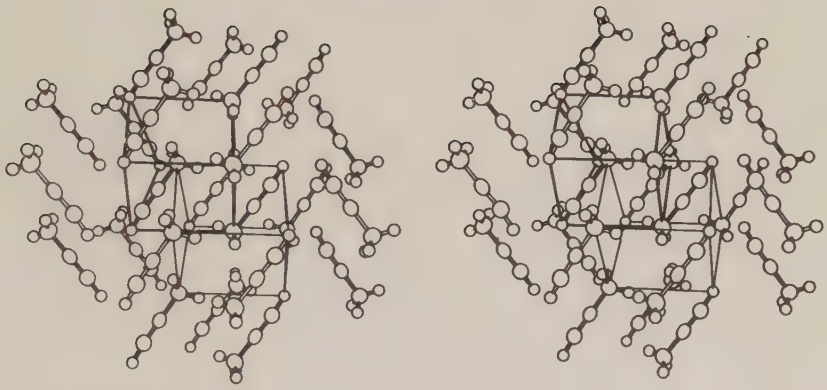


Abb. 5.10 Propin: Stereoskopische Ansicht der Stapelung dreier Schichten. Für die Methylgruppen zweier unabhängiger Moleküle ist die unterschiedliche Umgebung gezeigt.

Zahl und Anordnung der Nachbarn jedes Molekülendes entsprechen somit in allen drei Kristallstrukturen den Verhältnissen in der CsCl-Struktur. Auffälligerweise besetzen bei den stark polaren Molekülen Acetonitril und Isocyanomethan mit Dipolmomenten von 3.92 und 3.86 D (Ghosh et al., 1954) Cyano- bzw. Isocyanogruppen und Methylgruppen geordnet Positionen von Cs- bzw. Cl-Ionen. Im Propin dagegen mit seinem geringen Dipolmoment (0.75 D) gilt diese geordnete Besetzung für die unterschiedlichen Enden der Moleküle jeder unabhängigen Art in entgegengesetztem Sinne.

In Abb. 5.11 ist in Beschränkung auf jeweils eine der weiter vorne beschriebenen Schichten die Anordnung der Moleküle in den drei Strukturen schematisch wiedergegeben. Eine solche Diagonalfläche der "Würfel" entspricht einer Ebene (1 1 0) im CsCl-Gitter. Beim Propin ist schon innerhalb einer Schicht die alternierende Anordnung unterschiedlicher Molekülenden aufgehoben, während sie in Acetonitril und Isocyanomethan für die gesamte Struktur gegeben ist.

Abb. 5.11 Schematische Darstellung der Anordnung der Molekülenden in einer Schicht bei (von links) Isocyanomethan, Acetonitril und Propin. Leere und ausgefüllte Kreise kennzeichnen unterschiedliche Molekülenden. Nur bei Isocyanomethan und Acetonitril entspricht die Anordnung der unterschiedlichen Molekülenden derjenigen von Cs- bzw. Cl-Ionen in einer Ebene (1 1 0) der CsCl-Struktur.

Ein ähnlicher geschichteter Aufbau wie in den drei hier bestimmten, nicht isotypen Kristallstrukturen wird in den Strukturen einer Reihe weiterer linearer Moleküle aus wenigen Atomen gefunden. In Halogenocyanen (Heiart, Carpenter, 1956) und Halogenocyanoacetylenen (Bjorvatten, 1968) liegen alle Moleküle parallel zueinander mit von Schicht zu Schicht wechselnder Ausrichtung der Dipole; es resultiert eine dichteste Packung von Zylindern. Ähnlich kristallisieren Isocyanomethan und das isotype Kohlenstoffoxisulfid (Vegard, 1931) , allerdings mit paralleler Ausrichtung sämtlicher Dipole. In den Kristallstrukturen von Dicyanoacetylen (Hannan, Collin, 1953), Isocyansäure (v. Dohlen, Carpenter, 1955), Kohlenstoffdisulfid

(Baenziger, Duax, 1968), Kohlenstoffsulfidselenid (Brodalla, 1980), Acetonitril und Propin liegen dagegen die Längsachsen der Moleküle in zwei unterschiedlichen Richtungen innerhalb der Schichten.

5.3 Zur Polymorphie von Acetonitril und Isocyanomethan

Die Existenz einer Hoch- und einer Tieftemperaturmodifikation des Acetonitrils wurde von Negita et al. (1958) nachgewiesen. Er erhielt bei seinen NQR-spektroskopischen Untersuchungen bei schnellem bzw. langsamem Abkühlen der Probe unterschiedliche Spektren bei -196°C. Die Phasenumwandlung wurde von Putnam et al. (1965) kalorimetrisch untersucht. Pace und Noe (1968) schrieben ein von ihnen registriertes Röntgen-Pulverdiagramm der Tieftemperaturmodifikation zu. Die von ihnen vorgenommene Indizierung ist jedoch nicht vereinbar mit ihrem auch aus IR-Kristallspektren abgeleiteten Strukturvorschlag, nach dem sich acht Moleküle in paralleler Anordnung auf Spiegelebenen einer orthorhombischen Raumgruppe befinden.

Um die Phasenumwandlung zu untersuchen und die Phase, deren Kristallstruktur hier bestimmt wurde,einordnen zu können, wurden Simon-Guinier-Aufnahmen mit Abkühl- und Aufheizprogrammen angefertigt. Beim Aufheizen mit 3°C/h läßt sich dabei die beschriebene Phasenumwandlung einer stabilen Tieftemperaturmodifikation in eine Hochtemperaturmodifikation bei -57°C beobachten. Bei der Umwandlungstemperatur selbst treten einige zusätzliche Linien auf, die beim weiteren Aufheizen wieder verschwinden. Beim langsamen Abkühlen aus der Schmelze (2°C/h) tritt starke Unterkühlung auf. Bei -55°C kristallisiert dann eine Phase aus, deren Pulverdiagramm nicht völlig mit dem der beim Aufheizen erhaltenen Hochtemperaturphase übereinstimmt. Beim weiteren Abkühlen tritt bei -79°C Umwandlung in die Tieftemperaturmodifikation ein, die jedoch nicht immer vollständig verläuft. Beide Hochtemperaturmodifikationen lassen sich auf

-180°C abschrecken. Das Pulverdiagramm der beim Abkühlen aus der Schmelze zuerst auftretenden Phase stimmt mit dem aus den Ergebnissen der Einkristallstrukturanalyse berechneten überein; welche der beiden Hochtemperaturmodifikationen die stabile ist, konnte allerdings nicht festgestellt werden. Abb. 5.11 zeigt die beobachteten Pulverdiagramme (Strichdiagramme) der Tieftemperaturmodifikation und der beim Abkühlen aus der Schmelze auskristallisierenden Hochtemperaturphase sowie das berechnete Diagramm der Phase, von der ein Einkristall gezüchtet und die Struktur bestimmt worden ist. Das von Pace und Noe aufgenommene Diagramm ist mit keinem der hier ermittelten identisch.

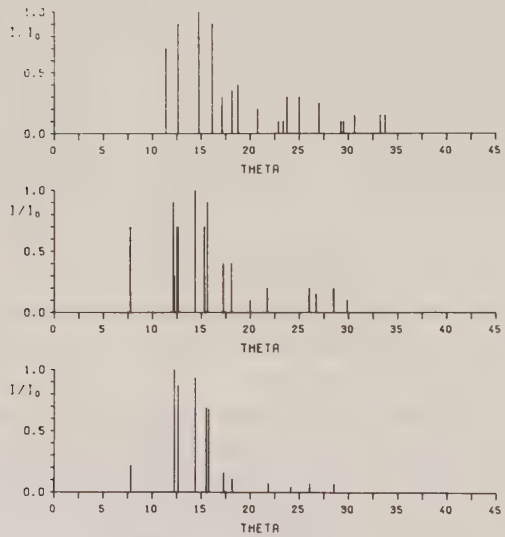


Abb. 5.12 Acetonitril: Pulverdiagramme (Strichdiagramme) der Tieftemperaturmodifikation bei -180°C (oben) und der beim Abkühlen aus der Schmelze auftretenden Modifikation bei -60° sowie das mit den Ergebnissen der Einkristallstrukturanalyse berechnete Diagramm (unten).

Beim Isocyanomethan konnte mit der Simon-Guinier-Technik eine Phasenumwandlung bei -55°C beobachtet werden, die in erster Linie nur in einer sprunghaften Verlängerung der Gitterkonstanten a um 48 pm beim Aufheizen besteht. Einsetzen der Rotation um die Molekülachse kann diese Änderung nicht bewirken, da die Einkristallstrukturanalyse an der Hochtemperaturmodifikation durchgeführt wurde und das unabhängige Wasserstoffatom zu lokalisieren war. Das beobachtete Pulverdiagramm der Hochtemperaturphase stimmt mit dem für die am Einkristall bestimmte Struktur gut überein. Wie ein Vergleich der Pulverdiagramme zeigt, ist keine der beiden Phasen mit einer der beim Acetonitril beobachteten isotyp.

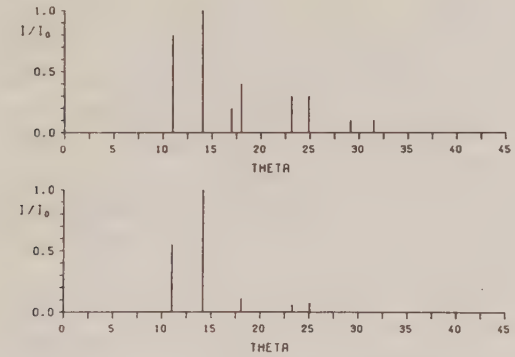


Abb. 5.13 Isocyanomethan: Beobachtetes Pulverdiagramm der Hochtemperaturmodifikation bei -50°C (oben) und das mit den Ergebnissen der Einkristallstrukturanalyse berechnete Diagramm (unten).

6. Zusammenfassung

Durch Röntgenstrukturanalyse wurden die Kristallstrukturen einiger organischer Verbindungen mit einfachen Molekülstrukturen bestimmt. Zur Zucht der Einkristalle war wegen der niedrigen Schmelzpunkte der Substanzen (zwischen -102 und -29.5°C) die Verwendung besonderer Techniken notwendig. Das Hauptgewicht der Arbeit liegt auf der Beschreibung der Packungsverhältnisse.

In der Kristallstruktur des Pyridins mit vier kristallographisch unabhängigen Molekülen in allgemeinen Lagen verlaufen alle molekularen Symmetrieachsen parallel zu der einen oder der anderen von zwei Achsen der orthorhombischen Elementarzelle in Schichten senkrecht zur dritten. Die Anordnung der Ringzentren erinnert an das kubisch-innenzentrierte Gitter. - Die Kristallstruktur des Pyridin-Trihydrats besteht aus zweidimensional-unendlichen, gewellten Schichten aus über Wasserstoffbrücken miteinander verbundenen Wassermolekülen und zwischen den Schichten eingebetteten Pyridin-Molekülen, zu denen O-H...N-Wasserstoffbrücken bestehen. Wasserschichten mit dem hier gefundenen Aufbau aus kondensierten Vier-, Fünf- und Sechsringen und mit den Protonen in geordneten Positionen waren bisher nicht bekannt.

Mesitylen und Mesitylen-Bromwasserstoff (1/1) bilden beide im Kristallgitter Schichtstrukturen aus. Beim Addukt handelt es sich vermutlich um einen Gitterkomplex mit nur schwachen Wechselwirkungen zwischen beiden Komponenten. Je zwei Moleküle Bromwasserstoff befinden sich in einem Hohlraum zwischen zehn Molekülen Mesitylen.

Trotz ihrer ähnlichen Molekülstrukturen kristallisieren Acetonitril, Isocyanomethan und Propin nicht isotyp. In allen drei Kristallstrukturen liegen alle Moleküle recht genau in parallelen Schichten. Nur im Isocyanomethan zeigen alle molekularen Dipolmomente parallele Ausrichtung. Bei allen drei Verbindungen lassen sich die Molekülenden in ein Raster einfügen, das dem der CsCl-Struktur entspricht. Bei den stark polaren Molekülen Acetonitril und Isocyanomethan besetzen die unterschiedlichen Molekülenden jeweils geordnet die Plätze von Cs- oder Cl-Ionen.

7. Verzeichnis der benutzten Rechenprogramme

E-XTL — Structure Determination System - Version of November 1976. Syntex Analytical Instruments, 10040 Bubb Road, Cupertino, Calif. 55014, USA

LAZY PULVERIX — Yvon, K., Jeitschko, W., Parthé, E. A Program to Calculate X-ray and Neutron Diffraction Powder Patterns - Version of December 1977. Laboratoire de Cristallographie aux Rayons-X, Université de Genéve, Geneva, Switzerland

OR TEP II — Johnson, C. K. (1976). A Fortran Thermal Ellipsoid Plot Program for Crystal Structure Illustration. ORNL-5138, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA

Für alle Rechnungen mit dem E-XTL - System wurde ein 32 K - Rechner (Eclipse S 200, Data General) verwendet; für alle anderen Berechnungen stand die Großrechenanlage TR 440 des Rechenzentrums der Universität Düsseldorf zur Verfügung.

8. Literaturverzeichnis

Abovyan, E. S., Myasnikova, R. M., Kitaigorodskii, A. I. (1977).
J. Struct. Chem. 18, 793
Study of the Durene - p-Dibromobenzene Binary Molecular System
2. Refinement of the Structure of Durene

Anderson, M., Bosio, L., Bruneaux-Poulle, J., Fourme, R. (1977).
J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol. 74, 68
Toluène: Structure cristalline et moléculaire de la variété stable α et état amorphe

Bacon, G. E., Curry, N. A., Wilson, S. A. (1964).
Proc. Roy. Soc. (London) 279 A, 98
A Crystallographic Study of Solid Benzene by Neutron Diffraction

Baenziger, N. C., Duax, W. L. (1968).
J. Chem. Phys. 48, 2974
Crystal Structure and Molecular Motion of Solid Carbon Disulfide

Bertinotti, F., Giacomello, G., Liquori, A. M. (1956).
Acta Cryst. 9, 510
Crystal and Molecular Structure of s-Tetrazine

Biswas, S. G. (1958).
Indian J. of Phys. 32, 13
X-Ray Analysis of Frozen Pyridine and its Solution at -180°C

Bjorvatten, T. (1968).
Acta Chem. Scand. 22, 410
Crystal Structure of Chloro and Bromo Cyanoacetylene

Brockway, L. O., Robertson, J. M. (1939).
J. Chem Soc. 1939, 1324
The Crystal Structure of Hexamethylbenzene and the Length of the Methyl Group Bond to Aromatic Carbon Atoms

Brodalla, D. (1980).
Unveröffentlicht, Universität Düsseldorf

Brown, H. C., Melchiore, J. J. (1965).
J. Am. Chem. Soc. 87, 5269
Complexes of Hydrogen Chloride and Hydrogen Bromide with Aromatic Hydrocarbons in n-Heptane Solution

Castellucci, E., Sbrana, G., Verderame, F. D. (1969).
J. Chem. Phys. 51, 3762
Infrared Spectra of Crystalline and Matrix Isolated Pyridine and Pyridine-D_5

Cook, D. (1956).
J. Chem. Phys. 25, 788
Relative Basicities of Alkylated Benzenes

Cook, D., Lupien, Y., Schneider, W. G. (1956).
Can. J. Chem. 34, 964
Molecular Interactions of Hydrogen Chloride with π-Orbital Donor Molecules II. Benzenes and Methyl Benzenes

Costain, C. C. (1958).
J. Chem Phys. 29, 864
Determination of Molecular Structure from Ground State Rotational Constants

von Dohlen, W. C., Carpenter, G. B. (1955).
Acta Cryst. 8, 646
The Crystal Structure of Isocyanic Acid

Ewert, M. (1937).
Bull. Soc. Chim. Belg. 46, 90
La Congélation des solutions aqueuses de composés organiques

Fourme, R., André, D., Renauld, M. (1971).
Acta Cryst. B 27, 1275
A Redetermination and Group-refinement of the Molecular Packing of Benzene II at 25 Kilobars

Germain, G., Main, P., Woolfson, M. M. (1970).
Acta Cryst. B 26, 274
On the Application of Phase Relationships to Complex Structures

Hassel, O., Stromme, K. O. (1958).
Acta Chem. Scand. 12, 1146
Structure of the Crystalline Compound Benzene- Bromine (1:1)

Hannan, R. B., Collin, R. L. (1953).
Acta Cryst. 6, 350
The Crystal Structure of Dicyanoacetylene

Heisig, G. B., Hurd, C. D. (1933).
J. Am. Chem. Soc. 55, 3485
Vapour Pressure and Boiling Point of Pure Methylacetylene

Jeffrey, G. A., McMullan, R. K. (1967).
Progr. Inorg. Chem. 8, 43
The Clathrate Hydrates

Kim, H. S. Jeffrey, G. A. (1970).
J. Chem. Phys. 53, 3610
Crystal Structure of Pinacol Hexahydrate

Kratochwill, A., Weidner, J. U., Zimmermann, H. (1973).
Ber. Bunsenges. physik. Chem. 77, 409
Röntgenstrukturuntersuchung des flüssigen Acetonitrils

Loisel, J., Lorenzelli, V. (1967/68).
J. Molec. Structure 1, 157
Etude du spectre IR de la pyridine cristallisée a la temperature de l'azote liquide

Maass, O., Russell, J. (1918).
J. Am. Chem. Soc. 40, 1561
Unsaturation and Molecular Compound Formation I

Mootz, D., Ohms, U., Poll, W. (1980).
Z. anorg. allg. Chem., im Druck
Schmelzdiagramm H_2O - HF und Strukturen der 1:1- und einer metastabilen 1:2 - Phase

Negita, H., Casabella, P. A., Bray, P. J. (1958).
J. Chem. Phys. 29, 1105
N^{14} Pure Quadrupole Resonances of Acetonitrile and Hydrocyanic Acid

Ohms, U. (1979).
Dissertation, Universität Düsseldorf
Phasenbeziehungen und Kristallstrukturen im System Wasser - Fluorwasserstoff sowie Beiträge zur Strukturchemie der 5-Sulfosalicylsäure

Pace, E. L., Noe, L. J. (1968).
J. Chem. Phys. 49, 5317
Infrared Spectra of Acetonitrile

Parkes, A. S., Hughes, R. E. (1963).
Acta Cryst. 16, 734
The Crystal Structure of Cyanogen

Pauling, L. (1973).
Die Natur der chemischen Bindung
Verlag Chemie, Weinheim

Putnam, W. E., McEachern, D. M., Kilpatrick, J. E. (1965).
J. Chem. Phys. 42, 749
Entropy and Related Thermodynamic Properties of Acetonitrile

Schuster, R. E., Scott, J. E., Casanova jr., J. (1973).
Org. Syntheses Coll. Vol. 5, 772
Methyl Isocyanide

Schwarzenbach, D. (1968).
J. Chem. Phys. 48, 4134
Structure of Piperazine Hexahydrate

Shallcross, F. V., Carpenter, G. B. (1958).
Acta Cryst. 11, 490
The Crystal Structure of Cyanoacetylene

Simon, A., Deiseroth, H.-J., Westerbeck, E., Hillenkötter,B. (1976).
Z. anorg. allg. Chem. 423, 203
Untersuchungen zum Aufbau von Tetracäsiumoxid

Sorensen, G. O., Mahler, L., Rastrup-Andersen, N. (1974).
J. Molec. Structure 20, 119
Microwave Spectra of ^{15}N and ^{13}C Pyridines, Quadrupole Coupling Constants, Dipole Moment and Molecular Structure of Pyridine

Steffen, M. (1980).
Dissertation, Universität Düsseldorf
Kristallstrukturen von Bortrifluorid sowie einfachen Trifluoroborsäuren und Oxonium-tetrafluoroboraten

Strieter, F. J., Templeton, D. H. (1962).
J. Chem. Phys. 37, 161
Crystal Structure of the Carbon Tetrabromide p-Xylene Complex

Vegard, L. (1931).
Z. Krist. 77, 411
Die Struktur von festem Kohlenoxysulfid bei der Temperatur von flüssiger Luft

Wheatley, P. J. (1955).
Acta Cryst. 8, 224
The Crystal and Molecular Structure of s-Triazine

Wheatley, P.J. (1957).
Acta Cryst. 10, 182
The Crystal and Molecular Structure of Pyrazine

Wheatley, P. J. (1960).
Acta Cryst. 13, 80
The Crystal and Molecular Structure of Pyrimidine

9. Strukturfaktortabellen

In den folgenden Tabellen sind für jeden Reflex mit den Indices h k l die beobachtete (F_{obs}) und die berechnete (F_{clc}) Strukturamplitude angegeben. Als nicht beobachtet eingestufte Reflexe sind mit einem Stern gekennzeichnet.

Pyridin	Seite 68-70
Pyridin-Trihydrat	" 71-74
Mesitylen	" 75-78
Mesitylen-Bromwasserstoff (1:1)	" 79-83
Acetonitril	" 84-85
Propin	" 86-88
Isocyanomethan	" 88

H	K	L	FOBS	FCLC
0	0	2	6.31	5.76
0	0	4	19.67	21.31
0	0	6	4.84	3.71
0	0	8	12.72	10.04
0	0	10*	4.43	5.26
0	0	12	39.19	39.58
0	1	1	10.26	10.20
0	1	3	32.69	29.92
0	1	5	10.25	9.14
0	1	7	9.09	8.99
0	1	9*	3.71	5.50
0	1	11*	6.05	5.70
0	1	13*	6.55	2.70
0	2	0	155.42	154.55
0	2	2	75.52	75.63
0	2	4	16.99	18.06
0	2	6	25.39	25.82
0	2	8	8.43	10.09
0	2	10	9.25	11.14
0	2	12	14.30	14.37
0	3	1	92.85	91.32
0	3	3	43.54	47.09
0	3	5	62.20	58.31
0	3	7	28.44	31.81
0	3	9	9.11	9.14
0	3	11	15.00	16.92
0	3	13*	4.97	4.11
0	4	0*	2.90	4.54
0	4	2	6.47	7.47
0	4	4	11.64	10.79
0	4	6	10.94	10.70
0	4	8*	3.51	3.71
0	4	10*	3.60	2.03
0	4	12*	[illegible]	0.96
0	5	1	46.42	43.92
0	5	3	22.64	22.20
0	5	5*	5.24	0.60
0	5	7	15.75	14.67
0	5	9	15.33	14.03
0	5	11	8.10	9.62
0	6	0*	3.33	0.07
0	6	2*	3.16	0.16
0	6	4	6.50	9.41
0	6	6	26.01	27.96
0	6	8*	3.65	7.53
0	6	10*	5.02	6.53
0	7	1*	4.72	3.41
0	7	3	6.97	11.01
0	7	5	14.52	14.23
0	7	7	11.45	12.90
0	7	9*	5.65	5.24
0	8	0	8.19	10.55
0	8	2*	3.06	4.04
0	8	4*	3.71	6.94
0	8	6	23.51	23.92
0	8	8*	3.04	3.67
0	9	1*	3.99	1.35
0	9	3*	4.32	1.35
0	9	5*	3.05	2.31
0	9	7*	3.92	1.39
0	10	0	15.90	15.04
0	10	2*	4.15	3.15
0	10	4	6.00	7.09
1	1	0	3.94	3.50
1	1	1	16.70	16.59
1	1	2	59.90	61.77
1	1	3	57.94	59.20
1	1	4	18.61	17.74
1	1	5	22.59	20.41
1	1	6	11.32	10.44
1	1	7	12.50	11.70
1	1	8*	3.01	1.40

H	K	L	FOBS	FCLC
1	1	9*	4.22	6.72
1	1	10	5.63	5.64
1	1	11*	5.34	2.05
1	1	12*	3.57	3.93
1	1	13*	3.68	2.70
1	2	0	72.07	74.80
1	2	1	45.03	46.54
1	2	2	43.17	43.97
1	2	3	69.00	69.40
1	2	4*	3.00	0.73
1	2	5*	4.17	6.37
1	2	6	12.89	12.65
1	2	7	10.05	10.04
1	2	8	5.40	3.65
1	2	9	16.39	15.22
1	2	10*	4.05	8.36
1	2	11	9.90	9.06
1	2	12	9.97	7.26
1	2	13*	3.71	3.72
1	3	0	32.90	32.43
1	3	1	37.83	36.10
1	3	2	25.51	27.13
1	3	3	17.20	18.47
1	3	4	34.31	33.24
1	3	5	26.09	20.26
1	3	6	6.26	5.87
1	3	7	13.84	13.84
1	3	8	13.42	14.56
1	3	9*	4.03	3.64
1	3	10*	4.47	2.65
1	3	11	6.13	6.30
1	3	12*	3.63	4.71
1	3	13*	4.79	0.35
1	4	0	7.34	7.43
1	4	1	8.97	9.07
1	4	2	14.10	16.64
1	4	3	14.53	12.96
1	4	4	27.01	20.57
1	4	5	10.29	12.35
1	4	6	27.64	27.53
1	4	7*	3.62	1.60
1	4	8	10.57	13.63
1	4	9	5.72	4.57
1	4	10	7.50	7.17
1	4	11*	3.53	2.03
1	4	12*	3.64	2.09
1	5	0	21.96	20.07
1	5	1	4.93	5.70
1	5	2	10.29	11.00
1	5	3*	4.76	3.00
1	5	4	27.70	31.32
1	5	5	6.41	7.75
1	5	6	20.35	21.44
1	5	7*	3.25	3.07
1	5	8	26.26	23.60
1	5	9	5.97	4.96
1	5	10*	3.40	2.77
1	5	11*	3.57	1.14
1	6	0	6.03	4.79
1	6	1*	3.14	0.60
1	6	2	6.63	6.72
1	6	3	7.13	7.26
1	6	4	9.15	9.25
1	6	5	12.15	12.90
1	6	6	34.46	36.09
1	6	7	7.60	7.43
1	6	8*	3.91	4.59
1	6	9*	3.41	1.74
1	6	10*	4.04	4.42
1	6	11*	3.09	0.07
1	7	0	7.26	10.37
1	7	1*	3.39	3.39

H	K	L	FOBS	FCLC
1	7	2*	3.60	3.23
1	7	3*	3.51	6.70
1	7	4	19.34	19.03
1	7	5	8.09	7.97
1	7	6*	3.66	2.75
1	7	7	6.52	5.01
1	7	8	17.11	17.03
1	7	9*	5.06	4.25
1	7	10*	3.65	1.40
1	8	0*	3.52	2.20
1	8	1	6.00	5.33
1	8	2*	3.57	1.42
1	8	3	13.10	12.03
1	8	4	6.76	4.09
1	8	5*	4.63	9.72
1	8	6	7.31	7.34
1	8	7*	5.56	5.13
1	8	8*	3.59	8.07
1	9	0*	3.66	1.46
1	9	1	9.04	7.62
1	9	2	7.25	4.10
1	9	3*	5.54	9.55
1	9	4*	3.76	4.50
1	9	5*	5.74	6.49
1	9	6*	3.07	1.69
1	9	7*	3.60	2.99
1	10	0*	4.31	2.27
1	10	1*	3.03	1.59
1	10	2*	4.24	2.63
1	10	3	10.45	8.66
1	10	4*	3.09	1.04
2	0	0*	1.50	4.23
2	0	1*	2.22	5.57
2	0	2	4.17	5.11
2	0	3*	3.90	[illegible]
2	0	4*	3.42	2.44
2	0	5	4.57	4.42
2	0	6*	2.62	3.15
2	0	7*	3.75	4.04
2	0	8*	2.90	3.17
2	0	9*	3.17	2.79
2	0	10*	3.36	6.00
2	0	11*	3.43	2.46
2	0	12*	3.56	2.06
2	0	13*	3.63	2.15
2	1	0	4.34	4.21
2	1	1	24.77	25.14
2	1	2	104.07	104.23
2	1	3	66.55	67.76
2	1	4	6.74	7.00
2	1	5	31.52	29.94
2	1	6	41.54	40.05
2	1	7	16.01	14.72
2	1	8*	4.02	2.62
2	1	9	7.05	9.57
2	1	10	16.26	14.57
2	1	11*	3.45	3.42
2	1	12*	3.67	1.37
2	1	13*	3.76	4.70
2	2	0*	2.40	0.70
2	2	1	41.31	41.91
2	2	2	39.17	37.54
2	2	3	59.73	56.57
2	2	4*	2.50	3.20
2	2	5*	2.57	2.23
2	2	6	5.20	3.66
2	2	7	10.29	10.95
2	2	8	5.19	5.06
2	2	9	17.39	16.74
2	2	10*	3.51	9.23
2	2	11*	3.45	7.44
2	2	12*	3.53	2.50

H	K	L	FOBS	FCLC
2	2	13*	3.74	1.00
2	3	0	10.36	16.07
2	3	1	5.32	5.23
2	3	2	10.65	11.60
2	3	3	8.37	9.10
2	3	4	21.07	22.47
2	3	5	5.03	4.24
2	3	6*	3.97	2.96
2	3	7*	3.01	1.33
2	3	8	8.03	9.46
2	3	9*	3.31	1.90
2	3	10*	3.41	2.10
2	3	11*	3.45	1.37
2	3	12*	3.64	2.12
2	4	0*	2.50	1.39
2	4	1	31.90	30.97
2	4	2*	2.90	2.52
2	4	3	69.43	66.96
2	4	4	26.43	22.94
2	4	5	14.62	15.90
2	4	6	9.00	5.26
2	4	7*	3.13	2.90
2	4	8*	3.79	9.29
2	4	9	19.39	19.96
2	4	10*	3.64	3.10
2	4	11*	3.56	0.77
2	4	12*	3.64	2.45
2	5	0	5.91	6.32
2	5	1	4.95	2.26
2	5	2*	2.72	5.04
2	5	3*	2.04	4.64
2	5	4*	2.90	1.03
2	5	5*	3.03	5.63
2	5	6*	3.15	2.30
2	5	7*	3.27	4.54
2	5	8	6.44	4.40
2	5	9*	3.36	3.17
2	5	10*	3.46	4.69
2	5	11*	3.61	1.41
2	6	0*	3.27	3.95
2	6	1*	4.94	7.02
2	6	2	10.21	10.31
2	6	3	11.03	9.79
2	6	4	12.39	11.79
2	6	5	21.19	20.25
2	6	6	8.03	0.20
2	6	7	17.02	16.67
2	6	8*	3.39	3.01
2	6	9	6.59	6.50
2	6	10	6.25	4.62
2	6	11*	3.69	1.94
2	7	0	10.62	12.72
2	7	1	5.73	6.26
2	7	2	8.36	6.02
2	7	3	8.92	10.06
2	7	4	20.21	19.09
2	7	5*	3.34	3.22
2	7	6*	3.39	3.39
2	7	7*	4.36	5.75
2	7	8	17.07	18.02
2	7	9*	4.60	4.41
2	7	10	6.60	3.03
2	8	0*	4.17	0.71
2	8	1*	3.06	3.06
2	8	2*	3.31	2.47
2	8	3	7.35	7.54
2	8	4*	3.37	1.62
2	8	5*	4.09	3.02
2	8	6*	3.47	1.50
2	8	7*	3.56	2.15
2	8	8*	3.62	2.32
2	9	0*	3.94	5.06

H	K	L	FOBS	FCLC
[illegible]	[illegible]	1*	[illegible]	[illegible]
[illegible]	9	[illegible]	[illegible]	[illegible]
[illegible]	9	[illegible]	[illegible]	[illegible]
[illegible]	9	4*	[illegible]	[illegible]
[illegible]	9	5*	[illegible]	[illegible]
2	9	6*	[illegible]	4.08
[illegible]	9	7*	[illegible]	[illegible]
2	10	0*	5.09	2.07
2	10	1*	3.57	0.48
[illegible]	10	2*	4.57	1.91
2	10	3	6.54	2.17
2	10	4*	[illegible]	1.51
3	1	0*	2.26	2.20
3	1	1	10.42	9.63
3	1	2	21.19	20.70
3	1	3	20.04	24.92
3	1	4	23.18	20.54
3	1	5	19.12	18.02
3	1	6	13.10	[illegible]
3	1	7	13.00	10.01
3	1	8	8.22	9.81
3	1	9*	4.10	6.72
3	1	10	5.71	4.45
3	1	11*	3.40	0.72
3	1	12*	3.56	3.88
3	1	13*	3.73	2.39
3	2	0	31.69	35.82
3	2	1	33.62	33.58
3	2	2	49.54	44.78
3	2	3	37.21	34.81
3	2	4	8.10	7.96
3	2	5*	3.86	3.93
3	2	6	5.21	3.93
3	2	7	7.82	8.81
3	2	8*	5.13	7.81
3	2	9	13.41	11.75
3	2	10*	3.44	5.90
3	2	11*	3.49	5.16
3	2	12*	3.61	2.88
3	2	13*	5.60	2.19
3	3	0	12.37	11.22
3	3	1	37.52	36.86
3	3	2	17.39	17.48
3	3	3*	2.64	4.28
3	3	4	16.56	15.76
3	3	5	23.77	22.11
3	3	6*	3.71	2.92
3	3	7	12.21	13.42
3	3	8*	3.23	2.99
3	3	9	6.80	5.42
3	3	10*	3.39	0.21
3	3	11	7.77	5.28
3	3	12*	3.57	2.15
3	4	0	14.72	16.29
3	4	1	13.38	12.47
3	4	2	6.98	5.16
3	4	3	6.91	8.39
3	4	4	9.64	8.72
3	4	5	8.22	8.60
3	4	6	13.51	13.55
3	4	7*	3.82	6.43
3	4	8*	4.36	1.40
3	4	9*	4.84	5.67
3	4	10	6.86	3.92
3	4	11*	3.51	8.74
3	4	12*	3.63	3.16
3	5	0	21.03	21.29
3	5	1	18.26	20.33
3	5	2	9.78	9.34
3	5	3*	4.04	4.31
3	5	4	8.24	12.83
3	5	5*	3.60	4.04

H	K	L	FOBS	FCLC
3	5	6	8.04	7.07
3	5	7	11.71	10.59
3	5	8	10.57	10.33
3	5	9*	3.39	3.14
3	5	10*	3.90	3.09
3	5	11	6.40	3.06
3	6	0	9.19	8.04
3	6	1	6.30	5.08
3	6	2	6.92	5.03
3	6	3	9.30	9.91
3	6	4	5.97	6.44
3	6	5	13.84	11.63
3	6	6	28.72	29.51
3	6	7*	3.80	6.92
3	6	8*	3.47	3.79
3	6	9	6.08	5.93
3	6	10*	5.39	3.61
3	6	11*	4.81	0.73
3	7	0*	3.18	1.79
3	7	1	12.73	15.90
3	7	2	8.65	6.90
3	7	3*	3.34	9.31
3	7	4	12.50	10.97
3	7	5	9.31	8.25
3	7	6*	3.95	1.33
3	7	7*	4.40	3.75
3	7	8	8.36	7.54
3	7	9*	4.36	7.22
3	7	10*	3.67	2.34
3	8	0*	4.30	9.47
3	8	1*	3.39	2.15
3	8	2*	5.14	7.28
3	8	3	7.74	6.55
3	8	4*	4.10	3.55
3	8	5*	3.45	4.72
3	8	6	7.08	10.30
3	8	7*	4.06	3.27
3	8	8*	3.59	3.92
3	9	0*	3.44	0.68
3	9	1*	3.55	7.45
3	9	2*	3.50	4.43
3	9	3*	5.29	5.36
3	9	4*	5.60	1.06
3	9	5	6.67	6.29
3	9	6	6.06	1.03
3	9	7*	3.60	2.96
3	10	0*	3.61	1.25
3	10	1*	3.76	0.94
3	10	2*	3.61	4.05
3	10	3*	4.99	6.29
3	10	4*	3.65	1.60
4	0	0	170.56	173.35
4	0	1	90.03	90.02
4	0	2	95.70	95.40
4	0	3	120.94	125.19
4	0	4	19.99	23.36
4	0	5	6.99	7.23
4	0	6	31.93	31.69
4	0	7	19.06	19.47
4	0	8	10.47	9.06
4	0	9	31.59	31.52
4	0	10	8.63	13.40
4	0	11	15.41	15.65
4	0	12	10.79	15.26
4	0	13*	3.75	8.54
4	1	0*	2.45	5.96
4	1	1*	3.56	3.60
4	1	2*	2.50	3.08
4	1	3	10.01	9.64
4	1	4	18.17	16.49
4	1	5*	2.73	3.08
4	1	6*	3.60	4.34

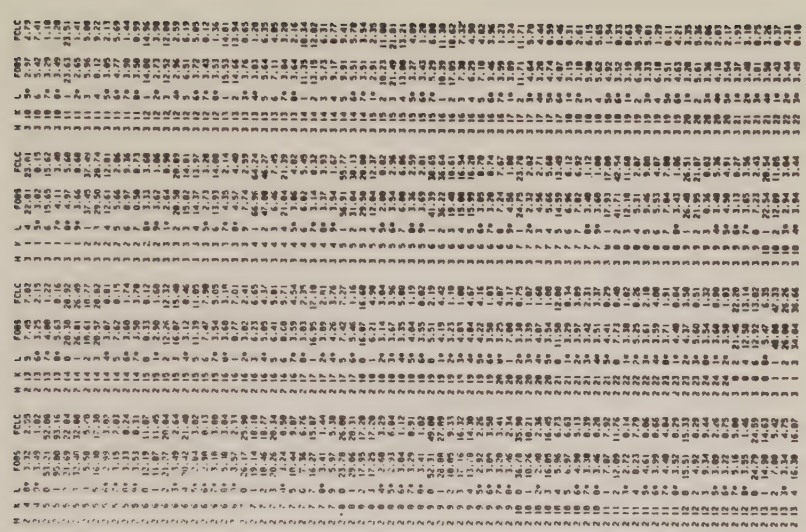
H	K	L	FOBS	FCLC
4	1	7*	2.91	5.50
4	1	8*	3.04	5.43
4	1	9*	3.67	4.04
4	1	10*	4.10	2.07
4	1	11*	3.47	2.79
4	1	12*	3.61	5.51
4	1	13*	3.75	3.25
4	2	0	11.00	15.30
4	2	1	8.04	9.20
4	2	2*	2.53	2.66
4	2	3	44.00	43.27
4	2	4	18.23	17.25
4	2	5	6.00	6.50
4	2	6*	2.09	5.70
4	2	7	14.62	14.49
4	2	8	8.91	9.74
4	2	9	15.60	14.00
4	2	10*	3.40	1.00
4	2	11*	3.53	3.77
4	2	12*	5.32	4.10
4	2	13*	3.89	1.15
4	3	0	5.06	3.79
4	3	1	49.30	47.05
4	3	2	22.17	23.03
4	3	3	9.93	8.14
4	3	4	29.65	20.04
4	3	5	34.24	35.52
4	3	6*	2.93	3.33
4	3	7	17.90	14.65
4	3	8	9.45	9.21
4	3	9*	3.32	3.40
4	3	10	6.45	6.50
4	3	11	10.31	8.00
4	3	12*	3.61	1.08
4	4	0	5.35	5.59
4	4	1	6.15	7.10
4	4	2*	2.59	1.31
4	4	3*	3.91	5.04
4	4	4*	3.09	4.75
4	4	5*	2.94	2.50
4	4	6*	4.61	6.57
4	4	7*	4.50	5.09
4	4	8*	3.30	2.63
4	4	9*	3.95	2.55
4	4	10*	3.41	2.22
4	4	11*	3.52	3.27
4	4	12*	3.64	0.04
4	5	0	8.12	11.02
4	5	1	10.13	17.51
4	5	2	30.44	32.26
4	5	3*	4.49	6.61
4	5	4	12.02	13.03
4	5	5*	5.04	4.10
4	5	6*	3.50	4.07
4	5	7*	3.30	7.43
4	5	8*	4.02	6.05
4	5	9	8.76	5.99
4	5	10	8.36	10.53
4	5	11*	5.67	4.65
4	6	0	0.66	0.07
4	6	1	7.70	9.22
4	6	2*	4.40	4.07
4	6	3	9.99	11.25
4	6	4	7.31	8.21
4	6	5	10.17	10.23
4	6	6	8.97	6.41
4	6	7*	4.20	6.04
4	6	8*	3.92	5.15
4	6	9*	4.45	2.39
4	6	10*	3.99	2.00
4	7	0	8.64	9.50
4	7	1	6.94	6.70

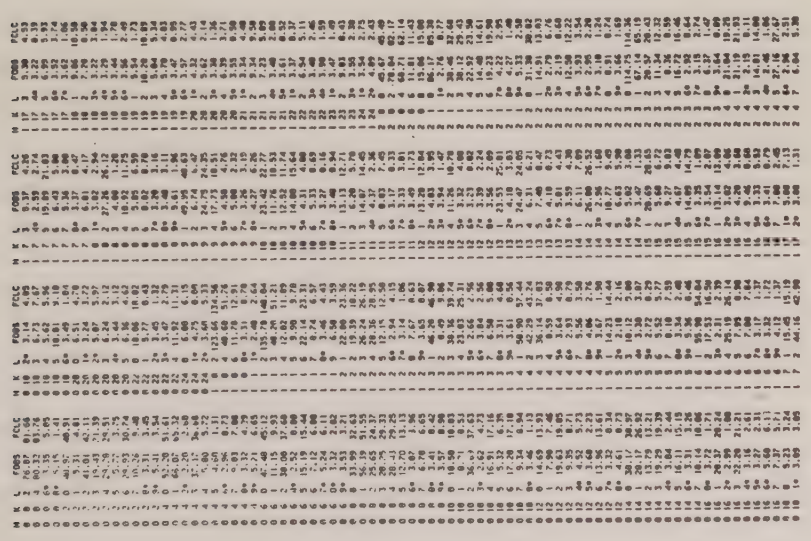
H	K	L	FOBS	FCLC
4	7	2*	3.26	4.51
4	7	3*	3.30	2.41
4	7	4	[illegible]	9.53
4	7	5	9.64	10.15
4	7	6*	3.42	4.54
4	7	7*	3.40	[illegible]
4	7	8*	5.44	4.73
4	7	9*	3.91	1.30
4	8	0*	3.35	3.09
4	8	1*	3.35	2.61
4	8	2*	5.26	4.40
4	8	3	12.94	13.21
4	8	4*	4.16	5.21
4	8	5*	3.51	6.04
4	8	6*	5.15	5.84
4	8	7*	5.74	8.51
4	8	8*	5.53	1.75
4	9	0*	3.52	0.97
4	9	1*	3.44	2.17
4	9	2*	3.90	1.26
4	9	3*	3.50	1.59
4	9	4*	3.94	0.46
4	9	5*	3.62	2.12
4	9	6*	3.63	1.51
4	10	0	9.30	6.91
4	10	1*	3.60	0.69
4	10	2*	5.92	2.51
4	10	3*	3.67	3.09
4	10	4	6.92	3.70
5	1	0	23.13	23.65
5	1	1	29.61	20.90
5	1	2	20.03	31.53
5	1	3	24.20	25.31
5	1	4	31.00	32.05
5	1	5	24.60	23.27
5	1	6	6.66	5.50
5	1	7	7.24	8.06
5	1	8	6.96	7.22
5	1	9*	3.25	2.25
5	1	10*	3.37	1.93
5	1	11*	4.01	3.09
5	1	12*	5.67	2.25
5	1	13*	3.71	1.33
5	2	0	9.09	6.76
5	2	1	10.42	17.90
5	2	2	21.01	20.69
5	2	3	33.60	34.12
5	2	4	16.07	17.62
5	2	5	20.05	17.74
5	2	6*	2.00	1.50
5	2	7	8.70	8.09
5	2	8	6.90	9.30
5	2	9	10.55	8.66
5	2	10	6.51	8.39
5	2	11*	3.52	3.26
5	2	12*	3.61	2.37
5	3	0*	2.49	1.40
5	3	1	20.26	20.51
5	3	2	13.00	11.90
5	3	3	14.97	16.40
5	3	4	13.59	13.13
5	3	5	20.00	21.02
5	3	6	6.75	8.50
5	3	7	10.79	9.77
5	3	8*	5.23	7.15
5	3	9*	3.37	4.90
5	3	10	6.90	5.87
5	3	11	7.67	6.84
5	3	12*	3.60	1.13
5	4	0	7.13	7.30
5	4	1	26.30	23.05
5	4	2	9.24	9.80

H	K	L	FOBS	FCLC
5	4	3	17.36	10.88
5	4	4	11.90	11.34
5	4	5*	3.41	5.33
5	4	6*	3.12	0.75
5	4	7	7.83	7.79
5	4	8*	3.35	1.36
5	4	9	5.59	1.25
5	4	10	4.25	4.25
5	4	11	4.79	4.94
5	4	12*	3.64	1.68
5	5	0	9.70	9.11
5	5	1	25.08	26.57
5	5	2	10.54	11.05
5	5	3	7.23	8.46
5	5	4*	4.21	1.55
5	5	5	11.13	10.22
5	5	6*	3.27	5.74
5	5	7	6.51	10.13
5	5	8	8.55	6.97
5	5	9*	3.46	3.49
5	5	10*	3.55	3.74
5	5	11	9.04	9.05
5	6	0	9.35	10.07
5	6	1	9.49	12.39
5	6	2*	4.61	5.08
5	6	3	20.03	21.11
5	6	4	7.97	7.08
5	6	5*	3.58	4.49
5	6	6*	4.95	4.82
5	6	7*	3.40	2.52
5	6	8*	4.30	2.87
5	6	9	7.00	7.17
5	6	10*	4.14	1.45
5	7	0	5.15	10.42
5	7	1	11.84	10.64
5	7	2	7.03	5.99
5	7	3*	3.56	5.95
5	7	4	8.86	9.19
5	7	5	7.74	8.51
5	7	6*	4.38	0.95
5	7	7*	5.00	3.68
5	7	8	6.72	7.72
5	7	9*	4.73	2.35
5	8	0	7.33	5.71
5	8	1*	3.35	1.51
5	8	2	7.91	0.15
5	8	3	7.77	12.24
5	8	4*	4.78	2.65
5	8	5*	3.90	2.44
5	8	6*	3.54	1.32
5	8	7*	3.58	1.58
5	8	8*	4.32	2.54
5	9	0*	3.56	4.49
5	9	1*	3.49	3.63
5	9	2*	3.56	4.29
5	9	3*	4.26	1.38
5	9	4*	3.54	2.84
5	9	5*	3.60	1.95
5	9	6*	3.58	2.34
5	10	0*	3.64	2.39
5	10	1*	3.62	2.00
5	10	2*	3.62	2.31
5	10	3*	3.71	4.72
6	0	0*	2.54	11.36
6	0	1	8.57	6.42
6	0	2*	2.59	9.01
6	0	3	7.26	8.32
6	0	4	5.04	6.08
6	0	5*	3.91	5.59
6	0	6*	2.82	2.27
6	0	7*	2.99	4.47
6	0	8*	3.16	3.08
6	0	9*	3.28	2.37
6	0	10*	3.67	2.76
6	0	11*	3.47	2.29
6	0	12*	3.59	5.41
6	1	0	23.53	19.96
6	1	1	88.21	86.95
6	1	2	16.56	17.21
6	1	3	28.01	24.27
6	1	4	31.76	33.99
6	1	5	63.90	59.75
6	1	6	8.22	8.54
6	1	7	29.54	29.64
6	1	8	14.43	13.99
6	1	9	9.17	6.06
6	1	10*	3.36	3.00
6	1	11	17.48	18.70
6	1	12*	4.81	3.38
6	2	0*	2.53	7.23
6	2	1	18.18	17.67
6	2	2	16.92	14.06
6	2	3	9.64	9.02
6	2	4	13.65	12.55
6	2	5*	4.50	3.76
6	2	6	8.60	8.90
6	2	7*	3.18	2.47
6	2	8*	3.20	4.54
6	2	9*	4.79	5.43
6	2	10*	4.77	3.45
6	2	11*	4.06	3.76
6	2	12*	3.58	2.03
6	3	0*	3.93	0.15
6	3	1	23.18	22.49
6	3	2	11.00	13.23
6	3	3	14.59	14.47
6	3	4*	3.12	0.33
6	3	5	17.50	17.27
6	3	6*	3.04	3.73
6	3	7	6.67	4.93
6	3	8*	3.25	2.17
6	3	9	7.63	6.29
6	3	10*	3.41	2.73
6	3	11*	3.64	4.64
6	3	12*	3.62	0.78
6	4	0	5.65	0.11
6	4	1	20.70	18.05
6	4	2	9.07	10.36
6	4	3	25.18	24.64
6	4	4	13.07	13.50
6	4	5	13.30	12.96
6	4	6	7.47	6.05
6	4	7	6.70	9.09
6	4	8	7.42	6.69
6	4	9	8.59	6.77
6	4	10*	4.01	5.36
6	4	11*	3.57	2.96
6	5	0*	2.98	2.92
6	5	1*	3.39	7.58
6	5	2*	2.95	0.89
6	5	3*	3.12	1.63
6	5	4*	3.09	4.04
6	5	5*	3.70	4.65
6	5	6*	3.27	1.40
6	5	7*	4.51	3.01
6	5	8*	3.36	2.94
6	5	9	6.51	8.53
6	5	10*	3.46	2.10
6	5	11*	3.63	2.65
6	6	0	5.15	1.84
6	6	1	12.11	11.90
6	6	2	16.26	16.06
6	6	3	7.60	8.71
6	6	4	11.64	15.61
6	6	5*	5.07	6.64
6	6	6	5.74	4.99
6	6	7*	4.64	4.03
6	6	8	7.96	7.11
6	6	9*	3.56	2.03
6	6	10*	3.65	6.77
6	7	0*	4.04	4.17
6	7	1	15.17	17.43
6	7	2	10.50	11.30
6	7	3*	4.73	5.34
6	7	4*	5.22	4.14
6	7	5	12.04	14.24
6	7	6	6.38	5.06
6	7	7*	3.46	6.06
6	7	8*	3.55	2.38
6	7	9*	3.61	1.51
6	8	0*	3.38	2.81
6	8	1*	3.49	1.06
6	8	2*	3.48	4.99
6	8	3*	3.41	4.57
6	8	4*	3.41	1.05
6	8	5*	3.44	1.61
6	8	6*	4.35	1.09
6	8	7*	3.59	1.46
6	8	8*	4.77	1.06
6	9	0*	4.05	4.35
6	9	1	6.95	8.04
6	9	2*	4.83	2.34
6	9	3*	3.53	1.97
6	9	4*	4.57	5.46
6	9	5	6.99	7.70
6	9	6	8.44	3.55
6	10	0*	3.71	0.60
6	10	1*	3.60	1.27
6	10	2*	4.69	1.05
7	1	0*	2.47	0.54
7	1	1	19.25	18.09
7	1	2	21.25	21.08
7	1	3	4.66	4.05
7	1	4	11.04	10.04
7	1	5	8.55	9.78
7	1	6*	2.94	6.60
7	1	7	6.91	3.35
7	1	8	8.32	0.00
7	1	9*	3.33	2.31
7	1	10	6.13	6.85
7	1	11*	3.52	2.36
7	1	12*	3.60	1.26
7	2	0	7.43	9.10
7	2	1	15.66	13.30
7	2	2	6.50	2.81
7	2	3	35.08	35.68
7	2	4	21.37	20.29
7	2	5	9.94	10.29
7	2	6	8.29	7.75
7	2	7*	4.94	7.76
7	2	8*	3.20	4.28
7	2	9	8.60	0.42
7	2	10*	3.40	2.57
7	2	11*	3.52	2.11
7	2	12*	4.37	0.65
7	3	0*	3.20	2.18
7	3	1	22.33	20.23
7	3	2	8.49	8.45
7	3	3	27.36	27.69
7	3	4	8.59	7.49
7	3	5	18.05	17.95
7	3	6	5.86	7.35
7	3	7	9.62	9.94
7	3	8*	3.50	2.53
7	3	9*	4.95	6.22
7	3	10*	3.44	1.32
7	3	11	6.87	5.29
7	3	12*	3.67	1.82
7	4	0*	2.77	4.47
7	4	1	15.27	14.98
7	4	2*	7.85	6.11
7	4	3	24.36	22.99
7	4	4	7.65	8.12
7	4	5	10.95	11.91
7	4	6*	3.17	3.26
7	4	7	10.17	9.83
7	4	8*	3.60	4.01
7	4	9	6.13	9.03
7	4	10*	4.09	3.43
7	4	11*	3.59	2.60
7	5	0*	2.93	2.82
7	5	1	13.10	13.36
7	5	2*	3.01	4.72
7	5	3	7.11	6.99
7	5	4*	3.12	1.74
7	5	5	17.49	18.41
7	5	6*	5.33	8.33
7	5	7	6.00	7.48
7	5	8*	3.03	1.37
7	5	9	6.77	5.67
7	5	10*	3.54	1.35
7	5	11*	4.94	2.93
7	6	0	14.41	14.27
7	6	1	5.58	2.20
7	6	2	8.30	7.32
7	6	3	19.76	21.55
7	6	4	9.98	10.58
7	6	5*	4.92	4.34
7	6	6	6.22	5.82
7	6	7	7.29	6.44
7	6	8*	3.71	4.36
7	6	9	12.60	11.77
7	6	10*	4.97	4.00
7	7	0	12.63	13.29
7	7	1	7.53	9.94
7	7	2	10.01	10.60
7	7	3*	5.42	5.64
7	7	4*	5.13	2.20
7	7	5	7.72	0.23
7	7	6*	3.45	5.63
7	7	7	6.36	5.60
7	7	8*	3.56	1.65
7	7	9*	4.76	2.15
7	8	0*	3.39	1.01
7	8	1*	3.39	1.07
7	8	2*	3.45	7.23
7	8	3	7.41	7.48
7	8	4*	3.41	1.96
7	8	5*	3.52	1.92
7	8	6*	3.50	1.05
7	8	7*	3.65	1.52
7	9	0*	3.60	7.00
7	9	1*	3.53	2.74
7	9	2*	3.61	2.00
7	9	3*	3.79	2.20
7	9	4*	3.60	2.23
7	9	5*	3.62	3.11
7	10	0*	3.72	2.10
7	10	1	6.54	2.61
8	0	0	7.02	5.73
8	0	1	37.06	39.62
8	0	2	6.92	10.12
8	0	3	73.15	67.02
8	0	4	43.76	39.30
8	0	5	24.09	24.43
8	0	6	43.03	43.21
8	0	7	6.30	7.32
8	0	8	16.54	19.96
8	0	9	21.79	23.09
8	0	10	10.28	9.26
8	0	11*	4.05	3.33
8	0	12*	3.64	0.81
8	1	0*	2.49	7.62
8	1	1	10.71	10.68
8	1	2	6.49	6.87
8	1	3*	2.61	3.51
8	1	4	4.59	4.05
8	1	5*	2.85	6.70
8	1	6*	3.04	3.01
8	1	7*	4.65	2.37
8	1	8	7.73	2.23
8	1	9*	3.38	5.11
8	1	10*	3.46	2.50
8	1	11*	5.50	1.20
8	1	12*	3.66	2.52
8	2	0	11.54	10.76
8	2	1	23.23	19.60
8	2	2	11.98	10.00
8	2	3	37.01	35.62
8	2	4*	4.51	2.99
8	2	5	5.86	6.46
8	2	6	10.96	11.12
8	2	7*	4.93	3.54
8	2	8	5.83	4.41
8	2	9	11.87	9.81
8	2	10*	3.43	0.74
8	2	11*	3.73	0.94
8	2	12*	4.82	2.56
8	3	0	6.34	6.99
8	3	1	25.23	24.39
8	3	2	18.06	19.46
8	3	3	18.24	18.91
8	3	4	11.60	11.46
8	3	5	15.24	17.99
8	3	6	7.20	4.26
8	3	7	5.62	6.31
8	3	8*	4.33	6.29
8	3	9*	3.91	2.48
8	3	10*	3.61	3.09
8	3	11	6.59	6.33
8	4	0*	2.84	2.49
8	4	1*	2.84	7.12
8	4	2*	2.87	2.11
8	4	3	7.50	0.63
8	4	4*	3.10	3.10
8	4	5*	3.14	1.22
8	4	6*	3.22	1.55
8	4	7*	5.15	4.20
8	4	8*	4.45	0.17
8	4	9*	3.49	1.44
8	4	10*	3.53	1.86
8	4	11*	3.59	2.00
8	5	0*	3.12	4.22
8	5	1	8.61	11.44
8	5	2	9.76	11.20
8	5	3	5.07	5.23
8	5	4	21.92	20.47
8	5	5	10.15	9.77
8	5	6*	4.01	3.57
8	5	7*	3.75	6.94
8	5	8	7.21	0.99
8	5	9*	3.55	1.00
8	5	10*	3.50	4.37
8	6	0*	3.22	4.00
8	6	1*	3.51	5.56
8	6	2	5.90	7.45
8	6	3	9.43	9.37
8	6	4*	3.35	3.54
8	6	5*	3.36	6.00
8	6	6*	3.44	1.50
8	6	7*	4.99	8.13
8	6	8*	4.81	2.22
8	6	9*	5.36	3.09
8	7	0	7.52	6.13
8	7	1	7.56	9.23
8	7	2	6.02	5.70
8	7	3*	5.16	4.38
8	7	4*	3.41	3.04
8	7	5*	3.40	0.64
8	7	6*	3.49	4.18
8	7	7*	3.53	1.02
8	7	8*	3.60	1.08
8	8	0	8.17	9.25
8	8	1*	3.47	1.17
8	8	2*	5.76	4.26
8	8	3*	5.35	10.10
8	8	4*	3.50	2.55
8	8	5*	3.57	3.36
8	8	6*	3.61	2.15
8	8	7*	3.65	5.28
8	9	0*	3.66	0.14
8	9	1*	4.16	2.20
8	9	2	5.99	0.79
8	9	3*	3.55	0.72
8	9	4*	3.62	0.50
8	9	5*	3.65	1.27
9	1	0	4.49	2.32
9	1	1	16.46	16.40
9	1	2	17.73	18.33
9	1	3	13.16	12.44
9	1	4	15.34	16.28
9	1	5	8.99	8.49
9	1	6	15.52	16.09
9	1	7	10.22	7.06
9	1	8	10.42	11.96
9	1	9*	3.36	2.79
9	1	10*	3.49	3.00
9	1	11*	3.57	3.61
9	1	12*	3.71	1.40
9	2	0	6.60	9.41
9	2	1	19.93	19.98
9	2	2	10.90	10.02
9	2	3	20.73	20.02
9	2	4	14.67	13.63
9	2	5*	3.12	4.59
9	2	6	6.06	6.06
9	2	7	7.57	6.58
9	2	8	10.23	10.14
9	2	9	6.24	4.36
9	2	10	6.27	1.17
9	2	11*	3.54	2.75
9	3	0	12.47	11.02
9	3	1	17.64	19.63
9	3	2	13.52	14.64
9	3	3*	2.91	4.90
9	3	4*	4.90	4.75
9	3	5	7.15	6.28
9	3	6*	3.22	1.27
9	3	7*	4.56	3.47
9	3	8*	3.35	2.16
9	3	9*	3.40	0.69
9	3	10*	4.95	8.15
9	3	11*	5.03	5.21
9	4	0*	4.77	4.50
9	4	1	7.39	9.10
9	4	2*	4.71	5.44
9	4	3	7.99	7.49
9	4	4	6.97	4.92
9	4	5	6.34	6.92
9	4	6*	3.69	4.72
9	4	7*	5.52	6.77
9	4	8*	3.30	1.00
9	4	9*	3.54	2.09
9	4	10*	3.92	3.63
9	4	11*	4.21	2.05
9	5	0	7.65	7.36
9	5	1	6.76	8.68
9	5	2	13.09	14.41
9	5	3	5.01	4.60
9	5	4	7.96	7.27
9	5	5	14.57	14.54
9	5	6*	3.29	1.31
9	5	7	8.03	9.50
9	5	8*	3.47	2.17
9	5	9	8.10	2.00
9	5	10*	5.41	2.38
9	6	0	13.75	16.98
9	6	1*	5.58	8.70
9	6	2*	3.27	1.41
9	6	3*	5.45	5.50
9	6	4*	4.44	1.20
9	6	5	5.05	4.04
9	6	6*	5.05	0.99
9	6	7	7.04	6.41
9	6	8*	3.56	4.67
9	6	9*	3.64	3.31
9	7	0*	5.50	3.39
9	7	1*	3.40	5.24
9	7	2	9.62	9.77
9	7	3	7.94	0.70
9	7	4*	3.45	1.71
9	7	5	8.76	9.00
9	7	6*	5.29	8.16
9	7	7*	5.24	6.04
9	7	8*	4.90	0.09
9	8	0	12.00	15.67
9	8	1*	3.70	2.13
9	8	2*	5.42	5.99
9	8	3*	5.23	3.90
9	8	4*	4.86	4.63
9	8	5*	3.60	0.93
9	8	6*	5.17	3.23
9	9	0*	4.42	5.51
9	9	1*	3.69	2.27
9	9	2*	3.62	2.50
9	9	3*	3.60	2.35
9	9	4*	3.64	3.50
10	0	0*	2.66	0.42
10	0	1*	2.71	4.17
10	0	2*	2.74	0.12
10	0	3	13.45	11.60
10	0	4	10.02	10.69
10	0	5	7.28	6.16
10	0	6	9.15	9.21
10	0	7*	3.24	3.76
10	0	8*	4.13	1.28
10	0	9*	4.37	4.96
10	0	10*	3.52	4.06
10	0	11	7.08	3.95
10	1	0	39.73	30.42
10	1	1	28.75	27.79
10	1	2*	4.03	7.31
10	1	3	10.67	9.40
10	1	4	29.00	31.07
10	1	5	7.33	7.76
10	1	6	11.50	11.66
10	1	7	10.53	9.68
10	1	8	31.44	27.03
10	1	9	10.74	10.57
10	1	10*	3.46	1.42
10	1	11	8.14	6.01
10	2	0*	3.29	0.40
10	2	1	8.71	9.15
10	2	2	12.38	11.09
10	2	3	16.01	10.54
10	2	4	13.35	13.59
10	2	5	7.57	5.01
10	2	6*	4.65	6.71
10	2	7*	3.25	5.00
10	2	8*	4.57	3.00
10	2	9*	5.24	5.91
10	2	10	6.26	5.04
10	2	11*	3.56	2.90
10	3	0*	2.95	4.29
10	3	1*	3.00	6.00
10	3	2*	2.95	4.71
10	3	3*	4.32	3.44
10	3	4	5.91	5.25
10	3	5*	3.19	5.72
10	3	6*	3.66	4.75
10	3	7*	3.20	2.69
10	3	8	5.96	5.10
10	3	9*	4.06	0.30
10	3	10	6.13	8.01
10	3	11*	3.60	2.50
10	4	0*	3.14	0.50
10	4	1*	3.00	2.69
10	4	2	10.19	17.63
10	4	3	21.55	21.06
10	4	4	5.57	9.26
10	4	5*	3.20	5.32
10	4	6	7.13	4.56
10	4	7	11.42	8.99
10	4	8*	5.30	3.51
10	4	9	11.35	10.03
10	4	10	10.79	8.94
10	5	0*	3.29	0.31
10	5	1*	3.20	2.93
10	5	2*	3.23	5.32
10	5	3*	3.22	2.23
10	5	4*	5.20	4.34
10	5	5*	3.31	1.51
10	5	6	5.69	3.36
10	5	7*	3.43	1.47
10	5	8*	3.05	2.65
10	5	9*	3.61	0.11
10	5	10*	3.65	1.59
10	6	0	6.00	0.30
10	6	1	15.50	16.00
10	6	2*	5.17	5.69
10	6	3	5.92	5.34
10	6	4*	3.30	3.63
10	6	5*	3.39	3.01
10	6	6*	3.42	0.66
10	6	7*	3.50	5.45
10	6	8*	3.53	1.36
10	6	9*	4.57	1.03
10	7	0	6.90	5.09
10	7	1*	5.59	7.94
10	7	2	12.69	12.67
10	7	3*	5.40	5.47
10	7	4*	3.46	2.93
10	7	5*	5.05	5.01
10	7	6*	4.10	6.12
10	7	7	6.49	4.09
10	8	0*	3.67	5.97
10	8	1*	5.65	1.96
10	8	2*	5.30	3.66
10	8	3*	3.59	3.09
10	8	4*	3.60	2.70
10	8	5*	4.41	0.42
10	8	6*	3.64	0.60
10	9	0*	3.00	1.36
10	9	1*	3.72	1.40
10	9	2*	3.75	1.09
10	9	3*	5.43	3.71

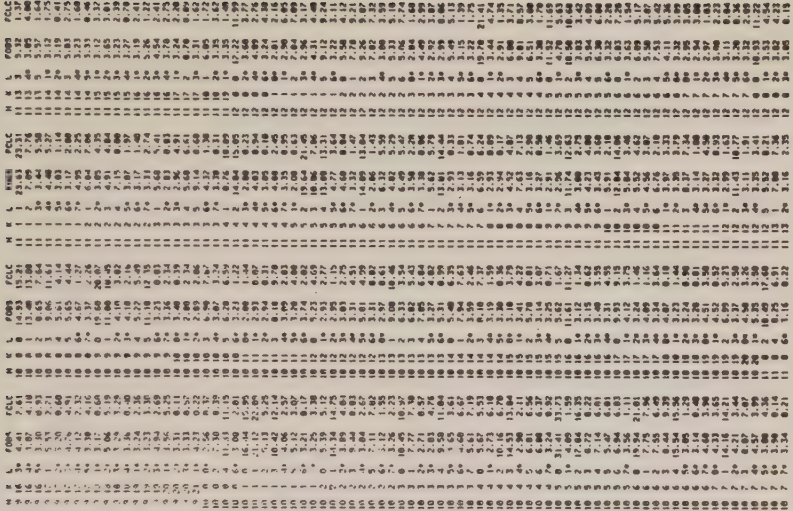
H	K	L	FOBS	FCLC	H	K	L	FOBS	FCLC	H	K	L	FOBS	FCLC	H	K	L	FOBS	FCLC
11	1	0	7.67	8.44	11	7	7*	4.17	0.67	12	5	7	8.69	9.00	13	5	7*	5.03	2.77
11	1	1	16.17	16.99	11	8	0*	3.77	1.23	12	5	8*	3.60	1.96	13	5	8*	5.01	1.70
11	1	2	12.20	13.27	11	8	1*	4.60	4.52	12	5	9*	3.67	1.90	13	6	0	20.69	20.97
11	1	3	6.75	6.36	11	8	2*	3.60	3.68	12	6	0	15.50	15.92	13	6	1*	3.55	3.29
11	1	4*	4.06	7.06	11	8	3*	3.63	5.90	12	6	1*	4.66	6.62	13	6	2*	5.02	0.12
11	1	5	7.00	3.67	11	8	4	6.47	2.06	12	6	2*	3.41	5.97	13	6	3*	3.79	4.11
11	1	6	6.10	6.07	11	8	5*	3.64	3.75	12	6	3*	3.43	3.14	13	6	4*	3.52	3.07
11	1	7*	4.96	6.33	11	9	0*	3.05	1.71	12	6	4*	4.70	6.31	13	6	5*	3.53	1.39
11	1	8*	3.41	2.10	11	9	1*	5.43	4.52	12	6	5*	5.02	0.70	13	6	6*	3.56	1.63
11	1	9*	3.44	2.22	12	0	0	8.81	5.21	12	6	6*	3.53	1.32	13	6	7*	3.60	0.40
11	1	10*	5.24	5.20	12	0	1	9.16	9.05	12	6	7*	5.52	1.04	13	7	0*	3.73	3.07
11	1	11*	3.66	4.35	12	0	2	8.67	0.31	12	6	8*	5.29	3.67	13	7	1*	5.53	4.71
11	2	0	12.30	11.16	12	0	3	15.47	14.15	12	7	0*	3.60	1.06	13	7	2	5.03	11.32
11	2	1*	3.81	4.70	12	0	4*	3.15	4.03	12	7	1*	3.65	6.54	13	7	3*	3.09	5.60
11	2	2	7.91	10.22	12	0	5	19.32	19.35	12	7	2*	4.60	4.31	13	7	4*	3.61	1.93
11	2	3	10.63	10.71	12	0	6	63.71	62.12	12	7	3*	5.36	3.90	13	7	5*	4.95	2.94
11	2	4	8.12	7.46	12	0	7	16.59	17.40	12	7	4*	5.30	5.70	13	8	0*	5.67	10.60
11	2	5	17.13	10.65	12	0	8*	3.72	0.00	12	7	5*	3.56	0.57	13	8	1*	3.00	5.50
11	2	6	20.10	20.56	12	0	9*	3.54	6.20	12	7	6*	3.50	1.81	13	8	2*	3.77	2.71
11	2	7	7.19	10.24	12	0	10	9.06	7.02	12	8	0	15.24	14.99	13	8	3	8.20	7.51
11	2	8*	4.23	2.69	12	0	11*	3.69	1.82	12	8	1*	3.76	3.77	14	0	0*	4.10	3.45
11	2	9*	3.45	3.21	12	1	0*	3.70	5.37	12	8	2*	5.73	3.03	14	0	1*	3.22	2.69
11	2	10*	5.55	5.71	12	1	1	7.42	0.55	12	8	3*	5.70	4.69	14	0	2*	5.25	4.70
11	2	11*	3.59	0.55	12	1	2*	3.06	6.24	12	8	4*	4.95	3.13	14	0	3*	3.21	5.46
11	3	0*	3.10	7.44	12	1	3*	3.06	0.25	13	1	0*	4.02	1.90	14	0	4	10.23	12.21
11	3	1	10.75	0.99	12	1	4*	4.40	2.20	13	1	1	5.91	5.35	14	0	5*	4.04	5.14
11	3	2	10.95	12.36	12	1	5*	3.47	7.03	13	1	2*	3.14	2.09	14	0	6*	3.47	6.10
11	3	3	6.05	4.60	12	1	6*	4.01	3.39	13	1	3	8.06	9.30	14	0	7*	3.52	5.03
11	3	4	10.29	6.59	12	1	7*	3.33	1.30	13	1	4	15.57	15.75	14	0	8*	3.54	6.16
11	3	5	13.13	14.76	12	1	8*	5.23	3.09	13	1	5*	5.50	5.49	14	0	9*	4.06	2.04
11	3	6	8.60	5.00	12	1	9*	4.16	4.11	13	1	6*	3.30	4.07	14	0	10*	3.67	3.53
11	3	7	6.90	7.97	12	1	10*	3.59	2.12	13	1	7*	5.47	5.19	14	1	0	13.67	16.12
11	3	8*	3.40	2.20	12	1	11*	3.60	4.10	13	1	8	13.25	13.02	14	1	1	9.06	9.90
11	3	9	7.75	4.61	12	2	0	11.07	9.07	13	1	9	8.49	5.09	14	1	2	6.00	6.02
11	3	10	5.99	4.50	12	2	1	5.33	3.92	13	1	10*	3.67	1.70	14	1	3	6.52	11.20
11	4	0	22.63	22.55	12	2	2*	3.75	1.06	13	2	0	7.81	0.30	14	1	4	26.99	24.72
11	4	1	13.03	13.12	12	2	3	10.10	10.91	13	2	1*	3.46	7.55	14	1	5	13.39	11.71
11	4	2	5.94	3.11	12	2	4	9.74	10.06	13	2	2	6.39	6.54	14	1	6	8.76	8.21
11	4	3	9.92	12.44	12	2	5	6.06	3.72	13	2	4	12.43	12.72	14	1	7*	3.40	1.02
11	4	4	8.42	8.50	12	2	6	26.12	25.40	13	2	5*	5.07	7.06	14	1	8	22.50	22.21
11	4	5*	3.28	4.15	12	2	7	0.97	6.39	13	2	6*	3.40	2.41	14	1	9*	3.64	3.60
11	4	6*	3.39	2.30	12	2	8	6.71	5.22	13	2	7*	3.51	7.13	14	1	10*	3.73	3.90
11	4	7*	3.40	2.03	12	2	9*	3.46	4.47	13	2	8	7.68	7.92	14	2	0*	3.42	7.00
11	4	8*	3.42	1.00	12	2	10*	4.30	4.30	13	2	9	10.75	9.00	14	2	1*	3.32	1.67
11	4	9	8.43	4.04	12	3	0*	4.30	10.39	13	2	10*	3.62	1.76	14	2	2*	3.31	1.73
11	4	10*	3.63	2.21	12	3	1	10.60	20.43	13	3	0*	3.39	2.59	14	2	3	14.14	14.91
11	5	0	11.60	14.72	12	3	2	7.49	0.55	13	3	1	9.66	10.20	14	2	4*	3.36	4.00
11	5	1	10.42	11.03	12	3	3	13.34	13.16	13	3	2	16.00	16.30	14	2	5	5.73	0.69
11	5	2	13.56	13.00	12	3	4	11.64	12.21	13	3	3*	4.01	0.37	14	2	6*	4.29	4.10
11	5	3	7.57	7.51	12	3	5	16.01	17.31	13	3	4	8.20	8.51	14	2	7*	4.19	2.14
11	5	4*	3.35	1.71	12	3	6*	3.39	4.16	13	3	5*	3.47	4.36	14	2	8	5.93	2.04
11	5	5	7.02	4.06	12	3	7*	5.60	7.00	13	3	6*	3.41	5.73	14	2	9	7.93	6.01
11	5	6*	3.46	7.34	12	3	8	10.63	7.07	13	3	7*	3.46	2.70	14	3	0*	5.67	4.72
11	5	7*	3.44	3.20	12	3	9	0.27	6.36	13	3	8*	5.12	7.55	14	3	1*	3.47	7.73
11	5	8*	3.53	0.36	12	3	10*	3.62	1.75	13	3	9	7.99	5.30	14	3	2*	4.09	5.61
11	5	9*	5.39	0.04	12	4	0*	3.34	3.00	13	4	0	17.64	16.01	14	3	3*	3.39	4.15
11	6	0	26.03	29.27	12	4	1	7.43	9.60	13	4	1	10.53	9.69	14	3	4	8.47	7.95
11	6	1	11.00	13.12	12	4	2*	3.29	4.24	13	4	2	12.91	12.64	14	3	5*	3.40	2.04
11	6	2	6.13	6.61	12	4	3*	3.50	1.07	13	4	3*	3.57	3.05	14	3	6*	3.44	0.96
11	6	3*	3.37	6.45	12	4	4	5.59	2.36	13	4	4	8.25	5.21	14	3	7*	5.69	1.46
11	6	4*	4.35	5.00	12	4	5*	3.05	2.00	13	4	5*	3.36	3.57	14	3	8*	3.64	5.14
11	6	5*	3.38	1.40	12	4	6*	3.65	2.91	13	4	6*	3.40	0.73	14	3	9*	4.12	2.51
11	6	6*	3.50	1.57	12	4	7*	5.06	5.14	13	4	7*	3.49	4.12	14	4	0*	3.60	6.10
11	6	7*	3.55	2.96	12	4	8*	3.40	1.15	13	4	8*	3.55	1.52	14	4	1	7.34	9.07
11	6	8*	3.63	2.49	12	4	9*	3.57	1.35	13	4	9*	3.59	2.55	14	4	2*	3.30	3.47
11	7	0*	3.61	1.51	12	5	0	9.21	7.04	13	5	0	7.53	5.10	14	4	3	17.07	10.06
11	7	1	9.76	9.10	12	5	1	7.27	6.94	13	5	1	9.99	13.66	14	4	4*	4.77	4.41
11	7	2	16.01	14.41	12	5	2*	4.49	5.59	13	5	2	24.06	22.76	14	4	5*	3.40	0.00
11	7	3*	3.44	3.33	12	5	3	10.09	11.12	13	5	3	6.11	3.21	14	4	6*	5.14	1.05
11	7	4*	3.56	2.00	12	5	4*	3.36	3.09	13	5	4*	3.40	5.50	14	4	7*	3.52	4.67
11	7	5*	3.40	2.29	12	5	5	11.75	13.05	13	5	5*	3.44	3.24	14	4	8*	3.64	3.56
11	7	6*	5.31	6.61	12	5	6*	3.45	4.24	13	5	6*	3.60	4.16	14	5	0*	3.65	2.25

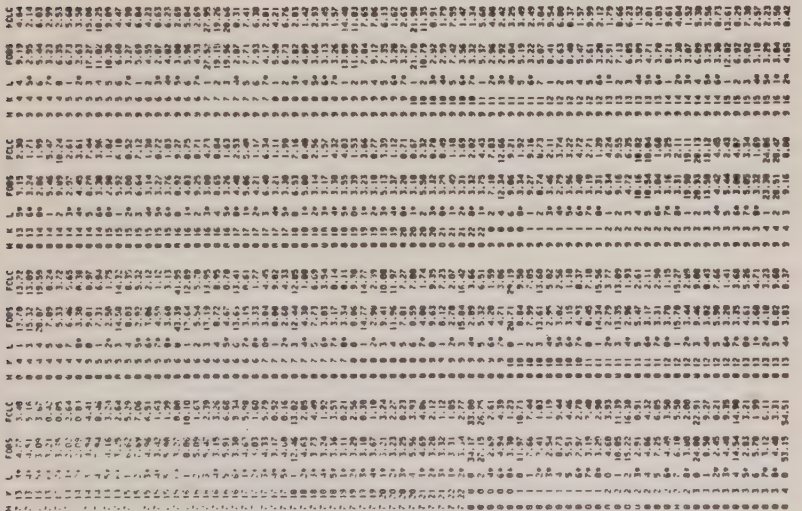
H	K	L	FOBS	FCLC	H	K	L	FOBS	FCLC	H	K	L	FOBS	FCLC	H	K	L	FOBS	FCLC
14	5	1*	3.64	4.45	15	5	2	8.59	7.00	16	5	1*	3.77	0.34	18	1	4	6.73	2.01
14	5	2*	3.40	2.67	15	5	3*	3.56	0.69	16	5	2	6.53	6.09	18	1	5	8.99	9.57
14	5	3*	4.03	1.90	15	5	4*	3.56	1.35	16	5	3*	3.63	4.79	18	1	6*	3.60	1.30
14	5	4*	3.49	4.69	15	5	5	5.01	4.05	16	5	4*	3.63	6.37	18	2	0*	3.00	4.41
14	5	5*	3.52	1.70	15	5	6	6.71	5.19	16	5	5	6.50	4.71	18	2	1*	3.73	1.60
14	5	6*	5.59	0.49	15	5	7*	3.63	2.52	16	5	6*	3.60	1.62	18	2	2*	3.65	4.11
14	5	7*	3.65	2.00	15	6	0	19.00	21.50	16	6	0*	3.90	3.92	18	2	3*	3.65	2.20
14	6	0*	4.84	5.05	15	6	1	6.60	3.21	16	6	1*	4.73	4.34	18	2	4*	3.61	0.61
14	6	1	8.39	6.11	15	6	2*	3.65	3.55	16	6	2*	3.03	3.20	18	2	5*	3.50	3.21
14	6	2	7.61	6.05	15	6	3	7.55	6.50	16	6	3*	3.77	2.51	18	2	6*	3.59	2.37
14	6	3*	3.56	3.29	15	6	4*	3.50	2.01	16	6	4*	3.70	2.04	18	3	0*	3.04	1.46
14	6	4*	3.50	3.04	15	6	5*	3.59	3.01	17	1	0*	3.62	1.16	18	3	1*	3.79	3.67
14	6	5*	3.50	2.05	15	7	0*	6.07	3.99	17	1	1	6.29	4.70	18	3	2*	5.49	3.10
14	6	6*	3.63	1.31	15	7	1*	4.50	3.65	17	1	2*	4.09	7.95	18	3	3*	3.65	1.55
14	7	0*	6.13	5.34	15	7	2*	3.00	4.40	17	1	3	7.04	5.63	18	3	4*	3.59	3.04
14	7	1*	3.00	3.61	15	7	3*	4.20	5.17	17	1	4*	3.51	3.06	18	3	5*	5.63	3.45
14	7	2	9.41	10.09	16	0	0	11.00	11.36	17	1	5*	4.70	4.35	18	4	0*	3.96	0.73
14	7	3*	3.72	3.19	16	0	1*	3.44	5.53	17	1	6*	3.56	1.60	18	4	1*	3.09	4.20
14	7	4*	3.63	3.38	16	0	2*	5.31	6.51	17	1	7*	4.25	1.30	18	4	2*	3.77	3.01
14	8	0*	4.00	3.04	16	0	3	16.06	17.13	17	2	0*	3.70	0.23	18	4	3*	3.76	3.27
15	1	0*	5.26	6.11	16	0	4*	3.40	9.96	17	2	1*	3.64	4.43	18	4	4*	3.71	3.79
15	1	1	8.70	9.34	16	0	5	11.36	12.13	17	2	2	7.99	5.35	18	5	0*	4.14	2.10
15	1	2*	3.32	5.23	16	0	6	16.95	16.63	17	2	3	8.90	10.03	18	5	1*	3.97	2.47
15	1	3	5.61	4.74	16	0	7*	3.59	2.46	17	2	4*	3.51	1.46	18	5	2*	3.03	1.05
15	1	4*	3.36	3.92	16	0	8*	3.61	4.00	17	2	5*	4.55	2.11	19	1	0	7.67	5.31
15	1	5*	[illegible].44	4.09	16	1	0*	4.02	4.41	17	2	6*	3.53	1.07	19	1	1*	4.39	2.23
15	1	6*	4.71	6.29	16	1	1*	4.96	3.03	17	2	7*	3.61	2.71	19	1	2*	3.69	2.45
15	1	7*	3.53	2.04	16	1	2*	5.33	5.11	17	3	0*	3.77	5.39	19	1	3*	4.61	2.40
15	1	8*	3.50	1.20	16	1	3*	3.75	2.35	17	3	1	7.71	4.99	19	1	4*	3.60	3.49
15	1	9*	3.00	2.52	16	1	4*	5.56	3.60	17	3	2*	3.65	5.20	19	1	5*	3.62	1.70
15	2	0*	4.30	2.10	16	1	5*	3.47	2.47	17	3	3*	3.59	3.97	19	2	0*	5.16	7.49
15	2	1*	5.65	6.43	16	1	6	6.76	6.77	17	3	4*	4.94	4.60	19	2	1*	3.92	3.61
15	2	2*	3.30	4.04	16	1	7*	3.50	4.43	17	3	5	6.00	5.50	19	2	2*	3.72	3.19
15	2	3	[illegible].63	9.01	16	1	8*	3.66	2.43	17	3	6*	3.63	0.66	19	2	3	6.67	7.69
15	2	4*	3.30	4.10	16	2	0*	5.36	3.67	17	4	0*	3.07	1.05	19	2	4*	5.55	2.09
15	2	5	8.79	8.75	16	2	1*	3.52	1.43	17	4	1*	3.00	1.11	19	2	5*	3.63	1.02
15	2	6	10.50	11.21	16	2	2*	3.44	3.70	17	4	2*	5.30	3.10	19	3	0*	4.02	3.46
15	2	7*	3.52	4.11	16	2	3	8.53	9.15	17	4	3*	3.63	0.04	19	3	1*	3.00	5.06
15	2	8*	3.93	4.05	16	2	4*	3.38	1.45	17	4	4	8.42	6.09	19	3	2*	5.00	2.52
15	2	9*	3.70	3.95	16	2	5*	5.46	5.06	17	4	5*	3.63	2.09	19	3	3	6.35	3.27
15	3	0*	3.57	3.36	16	2	6	6.15	5.79	17	4	6*	5.60	2.56	19	3	4*	4.41	2.49
15	3	1*	3.53	8.42	16	2	7*	3.54	1.62	17	5	0*	6.45	3.12	19	4	0*	4.11	0.39
15	3	2	6.30	7.34	16	2	8*	3.61	1.37	17	5	1*	3.92	6.47	19	4	1*	4.42	2.00
15	3	3*	3.91	2.51	16	3	0*	4.12	3.29	17	5	2	8.15	6.17	19	4	2*	4.43	3.65
15	3	4*	4.00	2.67	16	3	1*	3.59	6.63	17	5	3	6.39	4.10	20	0	0	10.13	9.62
15	3	5*	5.44	7.00	16	3	2*	5.10	3.50	17	5	4	7.00	4.97	20	0	1*	3.00	4.26
15	3	6*	3.47	3.30	16	3	3*	5.60	6.51	17	6	0*	4.04	0.73	20	0	2*	3.70	1.57
15	3	7	6.49	5.10	16	3	4*	3.49	2.72	17	6	1	6.00	1.64	20	0	3	9.21	10.50
15	3	8*	3.59	1.07	16	3	5	6.17	0.50	17	6	2*	3.92	2.25	20	0	4*	4.66	2.11
15	4	0	16.74	14.57	16	3	6*	4.33	3.47	18	0	0*	3.71	0.69	20	1	0*	3.92	2.55
15	4	1*	5.15	5.00	16	3	7*	5.51	5.79	18	0	1*	3.60	2.72	20	1	1*	4.33	2.07
15	4	2*	3.51	0.77	16	4	0*	3.01	2.03	18	0	2*	3.71	0.90	20	1	2*	3.70	1.62
15	4	3*	5.26	7.06	16	4	1*	3.63	4.26	18	0	3*	3.93	2.06	20	1	3*	3.70	2.46
15	4	4	7.05	6.25	16	4	2*	3.57	4.00	18	0	4*	4.30	4.20	20	2	0	7.50	6.00
15	4	5*	4.75	2.50	16	4	3*	3.61	3.02	18	0	5*	3.99	3.92	20	2	1*	3.92	1.92
15	4	6	6.31	1.77	16	4	4*	3.59	1.56	18	0	6*	3.56	6.46	20	2	2*	3.07	2.02
15	4	7*	3.50	0.56	16	4	5*	3.56	3.29	18	1	0*	3.06	3.33	20	2	3*	4.20	6.00
15	4	8*	3.72	4.30	16	4	6*	3.61	0.91	18	1	1	11.06	10.97	20	3	0*	3.76	2.43
15	5	0*	4.63	0.50	16	4	7*	3.65	3.43	18	1	2	9.20	10.50	20	3	1*	4.04	0.52
15	5	1*	4.20	6.19	16	5	0*	3.91	0.69	18	1	3	6.09	5.14					



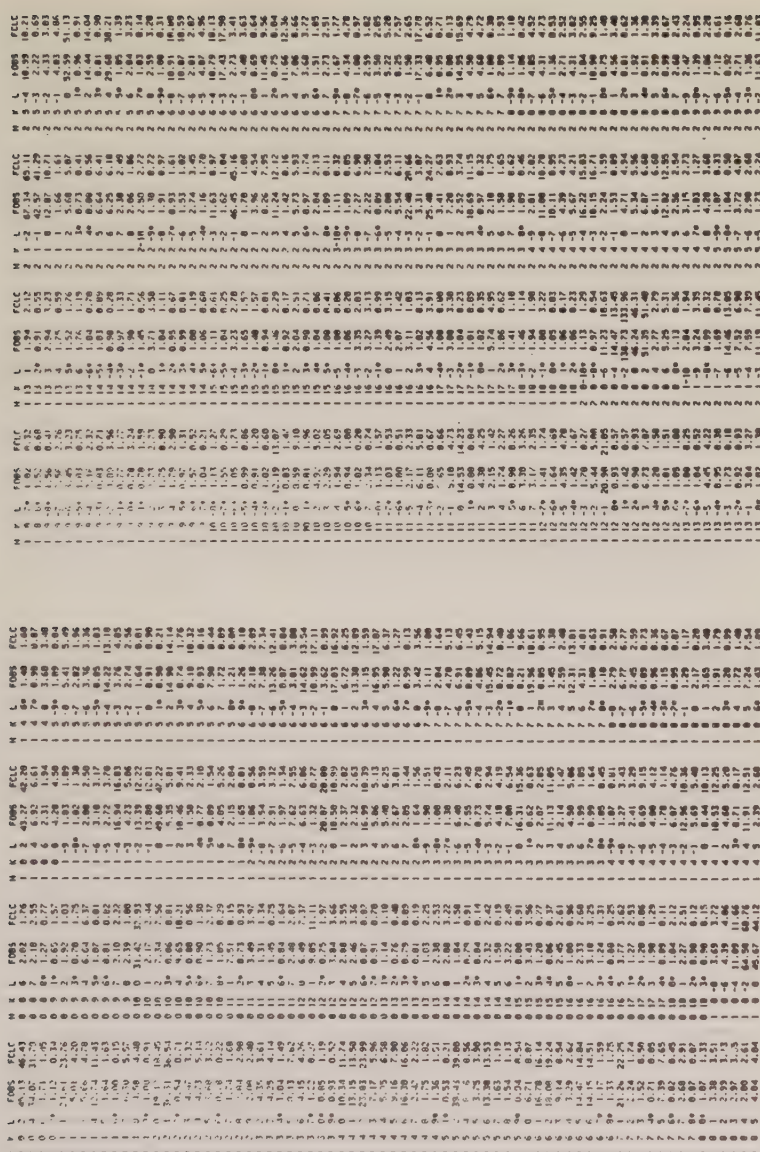


H	K	L	FOBS	FCLC
3	22	4*	3.57	2.40
3	23	1*	3.49	4.43
3	23	2*	3.52	1.50
3	23	3*	3.59	0.60
3	24	1*	3.58	4.46
3	24	2*	3.60	0.91
4	0	0	7.05	6.20
4	0	2	14.53	15.03
4	0	4	6.62	5.37
4	0	6*	4.51	2.47
4	0	8*	1.30	7.60
4	1	0	17.73	16.13
4	1	1	20.54	19.71
4	1	2*	2.73	0.15
4	1	3	8.74	8.05
4	1	4*	2.53	1.38
4	1	5	25.15	25.69
4	1	6*	4.91	2.82
4	1	7	6.49	7.59
4	1	8*	5.18	8.16
4	1	9*	4.20	8.60
4	2	0	85.34	81.63
4	2	1	6.34	5.64
4	2	2	14.43	14.06
4	2	3*	2.65	5.95
4	2	4	21.30	20.28
4	2	5*	2.76	2.16
4	2	6	10.97	10.43
4	2	7*	3.17	8.29
4	2	8*	3.36	2.12
4	2	9*	3.53	8.31
4	3	0*	2.25	1.65
4	3	1	21.35	15.51
4	3	2	45.29	45.38
4	3	4	29.44	29.82
4	3	5	7.74	7.11
4	3	6*	[illegible]	6.56
4	3	7*	3.17	0.78
4	3	8	5.75	6.29
4	3	9*	5.72	2.15
4	4	0	23.68	23.49
4	4	1	29.26	28.35
4	4	2	18.92	18.33
4	4	3	22.14	22.48
4	4	4*	[illegible]	2.44
4	4	5*	3.88	2.13
4	4	6	9.98	10.00
4	4	7*	3.24	1.13
4	4	8*	3.37	4.36
4	4	9*	3.56	0.10
4	5	0	46.86	45.85
4	5	1	48.00	47.81
4	5	2	29.81	30.02
4	5	3	14.71	13.99
4	5	4	6.35	7.07
4	5	5	17.11	17.95
4	5	6*	3.03	0.84
4	5	7*	3.19	2.00
4	5	8*	5.01	0.07
4	5	9*	4.71	1.61
4	6	0	47.37	44.58
4	6	1	20.49	19.97
4	6	2	18.52	18.27
4	6	3	25.26	24.25
4	6	4	11.29	11.48
4	6	5*	2.98	3.00
4	6	6	8.28	8.25
4	6	7	6.32	2.97
4	6	8*	3.70	0.20
4	6	9*	3.57	1.08
4	7	0	16.96	18.19
4	7	1*	2.29	2.27
4	7	2	4.78	1.21
4	7	3	14.18	14.21
4	7	4*	2.72	3.26
4	7	5	8.76	9.39
4	7	6*	4.49	5.78
4	7	7*	3.24	0.15
4	7	8*	3.42	2.51
4	8	0	41.56	40.01
4	8	1	14.00	14.68
4	8	2	9.93	10.23
4	8	3	16.21	16.17
4	8	4	13.04	13.55
4	8	5	5.36	7.35
4	8	6	6.73	6.82
4	8	7*	3.38	8.06
4	8	8*	4.33	8.58
4	9	0	24.08	24.33
4	9	1	8.36	8.96
4	9	2	13.63	14.60
4	9	3	8.33	9.03
4	9	4	18.68	20.56
4	9	5*	3.02	3.09
4	9	6*	3.16	3.04
4	9	7*	4.29	3.84
4	9	8*	3.49	4.98
4	10	0	4.59	4.28
4	10	1	6.52	7.02
4	10	2	11.09	11.89
4	10	3*	4.34	2.93
4	10	4*	2.98	1.83
4	10	5	8.05	8.97
4	10	6	7.32	5.17
4	10	7*	3.35	1.51
4	10	8*	3.52	1.54
4	11	0	18.15	19.35
4	11	1	17.83	18.00
4	11	2	12.06	12.19
4	11	3	12.97	14.02
4	11	4*	2.96	3.06
4	11	5*	3.09	2.24
4	11	6*	3.23	2.46
4	11	7*	3.37	1.53
4	11	8	6.07	8.68
4	12	0	10.05	9.73
4	12	1*	4.02	2.00
4	12	2	8.11	7.08
4	12	3*	2.88	1.86
4	12	4*	3.61	1.19
4	12	5	7.15	7.17
4	12	6	7.05	6.60
4	12	7*	3.43	3.93
4	12	8*	3.57	1.51
4	13	0	22.51	24.11
4	13	1	5.17	7.76
4	13	2*	2.05	1.24
4	13	3	12.90	12.05
4	13	4	5.14	6.00
4	13	5*	3.47	2.18
4	13	6*	4.70	6.13
4	13	7*	3.51	2.00
4	14	0	18.48	19.05
4	14	1	8.17	8.05
4	14	2*	2.94	4.64
4	14	3*	3.11	8.35
4	14	4	9.84	9.57
4	14	5	8.38	8.94
4	14	6*	3.39	1.51
4	14	7*	3.51	0.46
4	15	0	21.12	23.49
4	15	1*	3.03	1.73
4	15	2	7.32	7.28
4	15	3*	3.23	0.49
4	15	4*	3.74	4.93
4	15	5	5.76	4.04
4	15	6*	3.41	2.61
4	15	7*	5.67	7.25
4	16	0*	3.21	5.19
4	16	1	5.20	8.58
4	16	2*	3.07	3.36
4	16	3*	4.55	8.46
4	16	4*	4.01	8.73
4	16	5*	4.25	2.98
4	16	6*	3.47	4.45
4	16	7*	3.61	2.51
4	17	0	15.93	17.00
4	17	1	7.31	10.83
4	17	2*	4.87	4.90
4	17	3*	3.24	3.88
4	17	4	7.32	6.00
4	17	5*	5.45	6.58
4	17	6*	3.53	1.15
4	18	0	11.69	13.14
4	18	1*	3.82	4.39
4	18	2*	3.19	2.78
4	18	3*	3.26	2.67
4	18	4	8.32	6.54
4	18	5*	3.40	1.36
4	18	6*	3.59	2.10
4	19	0	10.89	11.19
4	19	1*	3.20	1.71
4	19	2*	3.24	1.00
4	19	3*	4.57	2.94
4	19	4*	3.41	2.01
4	19	5*	3.40	2.72
4	20	0*	4.38	0.64
4	20	1*	3.30	1.24
4	20	2*	3.34	2.69
4	20	3*	3.40	4.65
4	20	4*	4.31	1.78
4	20	5*	3.59	1.55
4	21	0*	3.36	0.04
4	21	1*	4.03	2.38
4	21	2*	5.54	1.02
4	21	3*	3.45	0.27
4	21	4*	3.71	3.89
4	22	0	6.30	6.18
4	22	1*	3.42	1.99
4	22	2*	3.46	0.69
4	22	3*	3.52	1.69
4	22	4*	3.88	1.78
4	23	0*	3.94	2.93
4	23	1	6.25	6.23
4	23	2*	3.56	0.18
4	23	3*	4.79	6.20
4	24	0*	3.57	2.30
4	24	1*	3.61	1.16
5	0	2	27.30	28.65
5	0	4	9.77	8.85
5	0	6	5.88	7.39
5	0	8*	5.46	5.88
5	1	1	61.43	64.96
5	1	2	28.93	28.98
5	1	3	5.03	5.54
5	1	4	7.74	8.07
5	1	5	6.03	7.79
5	1	6*	3.05	3.53
5	1	7*	3.18	2.81
5	1	8*	3.40	1.00
5	1	9*	4.59	3.90
5	2	1	44.03	45.21
5	2	2	39.00	39.45
5	2	3	17.60	18.63
5	2	4	8.79	10.22
5	2	5	5.44	4.59
5	2	6	5.58	6.27
5	2	7*	3.21	5.07
5	2	8*	5.24	5.37
5	2	9	6.65	8.66
5	3	1*	2.43	3.35
5	3	2	34.16	35.09
5	3	3	18.46	11.46
5	3	4	14.03	14.00
5	3	5	10.14	11.52
5	3	6*	3.04	8.77
5	3	7*	3.87	3.50
5	3	8*	4.98	3.87
5	3	9*	3.92	1.13
5	4	1	18.10	18.30
5	4	2	12.64	13.82
5	4	3	8.65	9.86
5	4	4*	2.85	3.23
5	4	5*	3.06	2.36
5	4	6*	3.86	4.74
5	4	7	6.87	5.80
5	4	8*	3.30	0.61
5	4	9*	3.57	8.19
5	5	1	24.20	24.39
5	5	2*	2.19	1.84
5	5	3	27.89	26.94
5	5	4	9.93	9.90
5	5	5	6.59	5.62
5	5	6	9.20	8.28
5	5	7*	3.88	1.16
5	5	8*	3.23	3.10
5	6	1	8.67	8.25
5	6	2*	2.24	2.59
5	6	3	25.15	24.01
5	6	4*	2.55	1.18
5	6	5*	2.74	8.59
5	6	6*	2.89	1.36
5	6	7	9.13	9.15
5	6	8*	3.20	2.13
5	7	1	27.61	25.23
5	7	2	12.94	12.81
5	7	3	19.58	19.65
5	7	4	6.35	5.57
5	7	5	5.05	4.95
5	7	6	6.06	5.68
5	7	7*	3.03	8.43
5	7	8*	3.21	8.08
5	8	1	27.28	26.27
5	8	2	4.45	4.38
5	8	3	9.21	10.11
5	8	4	7.47	8.57
5	8	5*	2.78	2.28
5	8	6*	4.40	3.40
5	8	7*	3.11	1.99
5	8	8	5.66	1.58
5	9	1*	2.37	4.43
5	9	2*	2.43	0.78
5	9	3	10.64	10.51
5	9	4*	4.28	3.73
5	9	5*	2.82	1.55
5	9	6*	4.81	6.73
5	9	7*	3.11	8.13
5	9	8*	3.27	0.68
5	10	1*	2.52	3.21
5	10	2	26.09	24.60
5	10	3	8.24	8.58
5	10	4	14.00	14.75
5	10	5*	4.15	3.99
5	10	6	11.24	10.34
5	10	7	5.32	5.93
5	10	8*	3.29	1.00
5	11	1	5.26	3.95
5	11	2	6.81	5.24
5	11	3	24.05	23.68
5	11	4*	3.82	1.74
5	11	5*	3.70	8.23
5	11	6*	3.03	4.32
5	11	7	6.58	7.82
5	11	8*	3.37	4.02
5	12	1*	2.58	8.79
5	12	2	17.17	16.68
5	12	3	10.06	11.59
5	12	4	6.46	8.04
5	12	5*	2.95	2.92
5	12	6*	3.11	2.61
5	12	7*	3.58	5.64
5	13	1	9.64	9.88
5	13	2	5.18	5.63
5	13	3*	3.37	2.18
5	13	4*	3.01	1.61
5	13	5*	4.08	4.08
5	13	6*	3.52	8.04
5	13	7*	3.71	2.86
5	14	1*	3.01	1.95
5	14	2	6.18	5.58
5	14	3*	2.85	1.81
5	14	4*	3.24	1.98
5	14	5*	4.97	2.04
5	14	6*	3.21	2.00
5	14	7*	3.29	0.86
5	15	1	11.07	11.68
5	15	2*	3.14	3.64
5	15	3*	2.89	2.21
5	15	4	6.84	5.11
5	15	5*	4.00	2.96
5	15	6*	3.22	4.93
5	15	7*	3.35	2.33
5	16	1*	2.04	1.26
5	16	2	4.08	9.28
5	16	3*	3.67	5.79
5	16	4*	3.03	0.40
5	16	5*	3.13	3.09
5	16	6	5.40	5.45
5	17	1*	4.45	0.93
5	17	2*	2.97	1.09
5	17	3*	3.01	0.39
5	17	4	5.21	5.55
5	17	5*	4.33	5.93
5	17	6*	3.30	2.79
5	18	1*	3.01	4.89
5	18	2	7.07	4.88
5	18	3	7.86	8.78
5	18	4*	3.12	1.64
5	18	5*	3.22	1.27
5	18	6*	3.38	0.37
5	19	1	7.41	9.74
5	19	2*	5.02	3.78
5	19	3	5.82	3.96
5	19	4*	5.13	4.38
5	19	5*	3.29	2.63
5	20	1*	3.06	1.26
5	20	2	6.64	6.65
5	20	3*	4.87	5.31
5	20	4*	3.27	2.96
5	20	5*	3.41	1.87
5	21	1*	3.15	0.59
5	21	2	5.79	4.18
5	21	3	7.23	4.98
5	21	4*	5.35	1.87
5	22	1	5.66	4.83
5	22	2*	3.29	4.28
5	22	3*	3.31	1.92
5	23	1*	3.34	2.13
5	23	2*	5.25	0.76
6	0	0	26.55	25.43
6	0	2	35.19	33.94
6	0	4*	4.18	5.58
6	0	6	6.78	7.48
6	0	8*	3.19	1.81
6	1	0	23.58	21.39
6	1	1	58.79	58.66
6	1	2	8.61	7.87
6	1	3	25.87	24.94
6	1	4	18.81	18.25
6	1	5	18.49	18.87
6	1	6	7.24	6.80
6	1	7	8.57	7.38
6	1	8*	3.16	1.84
6	2	0	25.54	25.36
6	2	1	9.86	10.38
6	2	2	12.36	13.36
6	2	3*	2.87	3.59
6	2	4	18.91	19.04
6	2	5	8.53	9.79
6	2	6*	2.85	1.33
6	2	7*	3.84	1.14
6	2	8*	3.38	1.66
6	3	0	57.89	56.97
6	3	1	18.38	18.62
6	3	2	12.38	12.17
6	3	3	11.16	13.00
6	3	4	11.04	10.19
6	3	5	10.51	10.79
6	3	6	5.93	5.11
6	3	7	7.36	5.77
6	3	8*	5.05	3.58
6	4	0	20.08	19.29
6	4	1*	2.16	0.94
6	4	3	9.86	8.62
6	4	4	12.21	12.56
6	4	5*	2.74	4.81
6	4	6*	2.98	1.36
6	4	7*	3.88	1.88
6	4	8*	4.43	3.50
6	5	0	9.41	9.65
6	5	1	5.14	4.18
6	5	2	14.46	13.91
6	5	3*	2.45	0.76
6	5	4	7.97	7.83
6	5	5*	4.24	5.03
6	5	6*	2.98	0.51
6	5	7	6.78	3.92
6	5	8*	3.22	1.85
6	6	0*	3.68	1.31
6	6	1*	2.24	1.82
6	6	2	7.62	9.18
6	6	3	7.99	7.86
6	6	4	8.84	9.05
6	6	5	14.13	13.80
6	6	6*	2.92	0.99
6	6	7	5.77	6.85
6	6	8*	3.22	1.82
6	7	0*	3.74	5.36
6	7	1	9.59	9.97
6	7	2	9.10	8.77
6	7	3	9.87	9.89
6	7	4*	2.65	2.74
6	7	5	15.58	15.15
6	7	6*	2.98	4.59
6	7	7*	4.19	2.42
6	7	8*	3.52	1.71
6	8	0	31.85	31.32
6	8	1	6.76	5.71
6	8	2	7.96	7.38
6	8	3	6.75	6.75
6	8	4	5.94	5.75
6	8	5	11.37	11.73
6	8	6*	4.74	3.36
6	8	7*	3.12	8.81
6	8	8*	5.17	3.81
6	9	0	36.72	36.41
6	9	1	21.31	20.20
6	9	2	4.31	1.44
6	9	3*	3.40	3.82
6	9	4	12.02	12.01
6	9	5	7.18	6.98
6	9	6	5.27	2.32
6	9	7*	3.19	3.34
6	9	8*	3.31	2.45
6	10	0	19.69	20.40
6	10	1	11.00	11.38
6	10	2	9.15	8.08
6	10	3	9.24	8.62
6	10	4	5.45	3.50
6	10	5*	4.13	4.73
6	10	6*	3.18	8.20
6	10	7	6.42	4.57
6	10	8*	4.87	3.72
6	11	0	5.65	5.99
6	11	1	19.79	20.05
6	11	2	5.74	5.81
6	11	3*	3.27	3.93
6	11	4	8.17	8.13
6	11	5	20.17	19.67
6	11	6*	4.55	4.18
6	11	7*	3.94	1.24
6	12	0*	2.63	3.59
6	12	1	13.17	13.65
6	12	2*	4.38	3.78
6	12	3	11.07	12.60
6	12	4*	2.98	8.71
6	12	5*	3.81	2.18
6	12	6*	5.01	3.18
6	12	7*	3.26	8.49
6	13	0*	2.67	3.57
6	13	1	11.06	11.18
6	13	2*	2.08	3.28
6	13	3*	3.96	4.34
6	13	4*	4.56	5.07
6	13	5*	3.03	1.88
6	13	6*	3.14	1.87
6	13	7	8.41	5.76
6	14	0	5.81	4.46
6	14	1*	2.79	1.64
6	14	2	5.59	5.82
6	14	3*	2.98	8.44
6	14	4	6.63	2.99
6	14	5*	3.18	8.38
6	14	6*	3.28	1.17
6	14	7*	4.45	1.71
6	15	0*	3.10	1.44
6	15	1	7.20	8.79
6	15	2*	2.87	3.26
6	15	3	5.27	4.69
6	15	4	5.34	3.91
6	15	5*	3.92	2.98
6	15	6*	3.26	0.98
6	16	0	7.58	6.44
6	16	1	5.65	3.15
6	16	2*	2.97	1.47
6	16	3*	4.23	5.38
6	16	4*	3.09	8.16
6	16	5*	3.18	2.32
6	16	6*	3.28	3.69
6	17	0	5.71	5.76
6	17	1	5.28	4.76
6	17	2	5.83	4.46
6	17	3	6.98	6.66
6	17	4*	4.95	6.45
6	17	5*	3.24	2.85
6	17	6*	3.33	8.98
6	18	0*	3.82	1.49
6	18	1	7.17	7.45
6	18	2*	3.82	2.45
6	18	3*	4.09	7.52
6	18	4*	3.28	1.29
6	18	5*	3.28	0.24
6	19	0*	3.86	1.62
6	19	1	7.34	7.75
6	19	2	6.79	5.08
6	19	3	7.72	5.58
6	19	4	5.45	3.38
6	19	5*	3.35	1.06
6	20	0*	3.14	2.41
6	20	1*	3.38	2.82
6	20	2*	3.17	1.61
6	20	3*	5.28	1.38
6	20	4*	3.29	1.47
6	21	0*	3.17	1.81
6	21	1*	3.37	3.78
6	21	2*	4.81	1.71
6	21	3*	3.29	2.14
6	21	4*	3.36	0.96
6	22	0*	3.25	4.15
6	22	1*	3.23	3.45
6	22	2*	3.38	0.94
6	22	3	6.01	3.36
6	23	0*	3.87	8.31
6	23	1	7.09	6.46
7	0	2	5.93	6.60
7	0	4	32.18	32.60
7	0	6*	3.02	3.18
7	0	8	5.45	3.52
7	1	1	14.44	14.21
7	1	2	7.95	7.31
7	1	3	5.40	5.39
7	1	4*	2.58	0.46
7	1	5*	2.77	0.94
7	1	6*	2.95	1.23
7	1	7*	3.08	2.32
7	1	8*	4.61	1.54
7	2	1*	3.22	1.58
7	2	2	38.39	37.98
7	2	3	18.61	19.14
7	2	4	12.60	12.74
7	2	5	7.03	6.38
7	2	6	10.42	11.11
7	2	7*	3.05	1.24
7	2	8*	3.23	0.60
7	3	1	5.57	4.38
7	3	2	27.95	27.69
7	3	3	14.89	15.54
7	3	4	6.22	7.22
7	3	5	8.25	7.31
7	3	6	11.19	11.14
7	3	7	7.20	8.15
7	3	8*	5.80	1.22
7	4	1	19.61	18.46
7	4	3	20.60	18.94
7	4	4	6.08	3.89
7	4	5*	4.35	4.13
7	4	6	8.94	7.33
7	4	7*	4.60	2.87
7	4	8*	3.26	1.97
7	5	1	15.70	15.82
7	5	2	6.73	7.61
7	5	3	6.33	9.42
7	5	4*	2.78	7.72
7	5	5*	2.84	1.08
7	5	6*	3.14	8.87
7	5	7	5.41	3.37
7	5	8*	3.29	2.24
7	6	1	29.44	30.89
7	6	2	13.05	13.08
7	6	3*	2.56	2.18
7	6	4*	2.79	1.15
7	6	5*	2.83	2.31
7	6	6*	3.79	2.83
7	6	7*	3.12	1.18
7	6	8*	3.29	1.76
7	7	1*	2.40	1.89
7	7	2	19.41	18.88
7	7	3	26.91	27.57
7	7	4*	3.33	3.18
7	7	5*	2.89	1.19
7	7	6	6.97	7.19
7	7	7	9.43	9.73
7	7	8*	3.38	2.14
7	8	1*	3.63	4.63
7	8	2	6.92	7.88
7	8	3	7.44	7.73
7	8	4*	4.33	4.81
7	8	5	5.56	6.84
7	8	6	6.88	6.46
7	8	7*	3.86	3.68
7	8	8	6.86	5.69
7	9	1	12.12	12.22
7	9	2	7.68	7.65
7	9	3*	2.78	1.93
7	9	4*	2.85	2.29
7	9	5*	2.96	5.26
7	9	6*	3.88	4.24
7	9	7*	4.52	5.23
7	9	8*	3.33	1.27
7	10	1*	2.61	1.69
7	10	2	30.83	30.44
7	10	3	14.86	14.17
7	10	4*	2.84	2.48
7	10	5	6.23	5.81
7	10	6*	3.11	8.87
7	10	7*	3.79	1.84
7	11	1	19.98	21.34
7	11	2*	2.81	1.56
7	11	3	6.18	5.59
7	11	4*	3.91	1.72
7	11	5	10.94	11.14
7	11	6*	3.77	3.58
7	11	7*	3.26	8.97
7	12	1	11.41	12.42
7	12	2	7.51	7.54
7	12	3*	4.35	8.08
7	12	4	9.16	9.15
7	12	5*	3.54	1.42
7	12	6*	3.19	8.82
7	12	7	6.18	3.40
7	13	1	15.66	16.09
7	13	2*	2.85	3.71





H	K	L	FOBS	FCLC
12	0	4	5.83	5.90
12	0	5e	3.30	3.75
12	0	6e	3.36	3.79
12	9	0e	3.97	3.93
12	9	1	6.25	7.33
12	9	2e	4.66	5.75
12	9	3e	4.78	5.31
12	9	4	5.81	6.48
12	9	5e	3.23	0.48
12	9	6e	4.45	2.32
12	10	0	10.79	9.83
12	10	1e	3.80	0.38
12	10	2e	3.85	0.22
12	10	3	6.49	3.85
12	10	4e	3.21	0.78
12	10	5e	3.27	0.00
12	11	0e	3.02	1.28
12	11	1e	4.92	4.75
12	11	2e	3.18	1.42
12	11	3e	3.13	2.24
12	11	4e	3.22	2.16
12	11	5e	3.65	0.02
12	12	0	13.15	13.05
12	12	1e	3.49	1.03
12	12	2e	3.11	2.43
12	12	3e	3.22	0.73
12	12	4	7.72	6.56
12	12	5e	3.62	0.56
12	13	0	13.72	12.99
12	13	1e	4.78	1.53
12	13	2	6.34	3.86
12	13	3e	3.21	3.12
12	13	4	5.31	3.31
12	14	0e	4.31	4.98
12	14	1e	3.15	1.19
12	14	2e	4.68	1.95
12	14	3e	3.26	0.71
12	14	4e	3.33	0.37
12	15	0e	5.17	0.43
12	15	1e	3.18	1.31
12	15	2e	3.46	0.14
12	15	3	5.45	1.48
12	16	0e	3.43	5.71
12	16	1e	3.38	0.71
12	16	2e	4.43	3.35
12	16	3e	3.31	2.43
12	17	0e	3.26	1.29
12	17	1e	3.28	0.65
12	17	2e	3.31	0.88
12	18	0	7.37	8.16
12	18	1e	3.36	0.13
13	0	2e	2.96	3.02
13	0	4e	3.18	1.51
13	0	6e	4.98	1.52
13	1	1e	2.92	2.83
13	1	2e	7.66	5.67
13	1	3	13.25	13.52
13	1	4e	3.13	2.85
13	1	5e	3.21	1.62
13	1	6e	3.38	0.74
13	2	1	6.21	4.24
13	2	2e	2.98	3.45
13	2	3e	4.15	2.65
13	2	4	5.44	7.31
13	2	5e	3.28	1.39
13	2	6e	3.59	3.06
13	3	1e	2.99	3.36
13	3	2e	3.81	2.37
13	3	3e	3.87	2.39
13	3	4e	3.14	1.56
13	3	5e	3.78	4.66
13	3	6	5.80	8.28
13	4	1	7.25	7.66
13	4	2	11.39	11.37
13	4	3e	3.80	4.76
13	4	4e	3.13	2.26
13	4	5e	3.22	1.43
13	4	6e	3.33	0.22
13	5	1	8.96	9.14
13	5	2e	3.81	2.27
13	5	3e	3.11	2.55
13	5	4	5.65	4.11
13	5	5	5.48	1.54
13	5	6	7.17	6.85
13	6	1e	3.83	3.83
13	6	2	5.12	4.34
13	6	3e	4.97	7.10
13	6	4	6.83	9.27
13	6	5e	4.78	1.69
13	7	1	5.98	4.37
13	7	2	6.21	5.81
13	7	3e	3.34	0.53
13	7	4e	3.10	1.49
13	7	5e	3.29	0.18
13	8	1	7.13	5.13
13	8	2e	3.89	5.11
13	8	3e	3.15	1.74
13	8	4e	4.41	4.34
13	8	5e	3.29	0.46
13	9	1	12.10	11.16
13	9	2e	3.19	2.78
13	9	3e	3.16	3.23
13	9	4e	4.31	2.11
13	9	5e	3.29	0.31
13	10	1e	3.89	1.38
13	10	2e	3.78	0.21
13	10	3e	4.23	0.54
13	10	4e	3.30	0.15
13	10	5e	3.33	0.72
13	11	1e	3.12	1.83
13	11	2	7.96	6.57
13	11	3e	3.22	2.91
13	11	4e	3.32	0.74
13	12	1e	3.16	0.37
13	12	2e	5.10	2.98
13	12	3e	3.28	3.09
13	12	4e	3.86	1.16
13	13	1e	3.24	2.08
13	13	2e	5.15	5.26
13	13	3e	5.85	4.79
13	13	4e	3.33	3.88
13	14	1e	3.43	1.41
13	14	2e	3.27	4.66
13	14	3e	5.45	4.64
13	15	1e	3.27	1.95
13	15	2e	3.38	1.56
13	16	1e	3.34	2.86
13	16	2e	3.80	1.89
13	17	1e	3.07	0.38
14	0	4e	3.23	4.84
14	0	6e	4.14	7.78
14	1	1e	3.82	2.48
14	1	2e	3.88	1.07
14	1	3e	3.14	1.55
14	1	4e	3.20	2.85
14	1	5	5.66	2.53
14	2	0	12.99	13.13
14	2	1e	3.03	3.60
14	2	2e	4.95	4.78
14	2	3e	3.23	4.25
14	2	4e	3.20	0.00
14	2	5e	4.32	0.47
14	3	0	8.35	7.99
14	3	1	5.75	4.12
14	3	2e	3.87	0.93
14	3	3e	3.14	1.61
14	3	4e	3.28	1.46
14	4	1e	3.42	0.24
14	4	2e	3.24	3.96
14	4	3	7.49	6.96
14	4	4	8.67	7.62
14	5	1e	3.15	1.76
14	5	2e	3.22	3.58
14	5	3e	4.74	2.89
14	5	4e	3.31	0.85
14	6	1	7.98	7.88
14	6	2	7.85	7.17
14	6	3e	3.27	1.48
14	6	4e	5.31	2.99
14	7	1e	3.21	2.16
14	7	2e	3.26	2.22
14	7	3e	3.31	0.59
14	7	4e	3.34	1.44
14	8	1e	3.21	3.07
14	8	2e	3.42	3.33
14	8	3e	3.30	2.85
14	9	1e	3.23	1.95
14	9	2e	3.33	4.71
14	9	3e	3.31	0.96
14	10	1e	3.25	0.75
14	10	2	5.94	3.85
14	10	3e	4.35	1.90
14	11	1e	3.31	0.98
14	11	2e	3.30	3.93
14	12	1e	3.34	3.80
14	12	2	12.60	12.81
14	13	1e	3.13	2.36
14	13	2e	3.19	3.93
14	14	1	5.51	3.63
14	14	2	5.66	4.87
14	15	1	6.49	6.86
14	15	2	3.99	4.48
14	16	1e	3.17	0.55
14	16	2e	3.26	2.71
14	16	3e	3.64	2.83
14	17	0	9.26	9.58
14	17	1e	3.21	1.03
14	17	2e	3.26	5.20
14	18	1e	3.26	1.49
14	18	2e	3.33	2.18
14	19	1e	3.21	1.07
14	19	2e	3.22	0.26
14	19	3e	3.26	2.87
14	20	1e	3.32	1.90
14	20	2	7.02	8.20
14	21	1e	3.22	1.13
14	21	2e	3.24	0.74
14	22	1e	3.31	1.01
14	22	2e	3.32	3.14
14	23	1e	3.27	0.78
14	23	2e	3.32	3.13
14	24	1e	3.27	1.96
14	24	2e	3.50	0.95
15	0	2e	3.13	1.44
15	0	4e	3.27	1.94
15	1	1e	3.15	0.88
15	1	2e	3.18	4.23
15	1	3e	3.21	2.37
15	1	4e	3.20	0.75
15	2	1e	3.48	2.24
15	2	2	9.03	9.61
15	2	3e	3.24	3.59
15	2	4e	4.29	2.17
15	3	1e	3.33	4.20
15	3	2e	3.15	2.29
15	3	3e	4.03	4.78
15	3	4e	3.20	1.15
15	4	1e	3.42	0.24
15	4	2e	3.24	3.96
15	4	3	7.49	6.96
15	4	4	8.67	7.62
15	5	1e	3.15	1.76
15	5	2e	3.22	3.58
15	5	3e	4.74	2.89
15	5	4e	3.31	0.85
15	6	1	7.98	7.88
15	6	2	7.85	7.17
15	6	3e	3.27	1.48
15	6	4e	5.31	2.99
15	7	1e	3.21	2.16
15	7	2e	3.26	2.22
15	7	3e	3.31	0.59
15	7	4e	3.34	1.44
15	8	1e	3.21	3.07
15	8	2e	3.42	3.33
15	8	3e	3.30	2.85
15	9	1e	3.23	1.95
15	9	2e	3.33	4.71
15	9	3e	3.31	0.96
15	10	1e	3.25	0.75
15	10	2	5.94	3.85
15	10	3e	4.35	1.90
15	11	1e	3.31	0.98
15	11	2e	3.30	3.93
15	12	1e	3.34	3.80
15	12	2	12.60	12.81
16	0	2e	4.42	1.55
16	1	0e	3.23	4.75
16	1	1e	3.21	1.84
16	1	2e	3.24	0.39
16	1	3e	5.07	0.95
16	2	0	11.52	10.94
16	2	1e	3.21	0.32
16	2	2e	3.27	2.55
16	2	3e	3.30	0.25
16	3	0e	3.19	1.68
16	3	1e	3.23	0.19
16	3	2e	3.25	1.25
16	3	3e	3.31	1.63
16	4	0	5.93	4.58
16	4	1e	3.42	4.56
16	4	2e	3.32	4.48
16	4	3e	3.55	4.80
16	5	0e	3.25	1.58
16	5	1e	4.17	4.08
16	5	2e	3.23	1.33
16	5	3e	3.35	1.32
16	6	0	6.96	6.85
16	6	1e	3.26	0.93
16	6	2e	4.25	1.36
16	6	3e	3.47	2.34
16	7	0e	3.31	0.63
16	7	1e	3.30	2.12
16	7	2e	3.38	0.53
16	8	0e	4.55	2.38
16	8	1e	5.06	3.52
16	8	2e	4.63	4.25
16	9	0e	4.38	3.12
16	9	1e	3.36	2.85
16	10	0e	3.38	4.06
17	0	2e	5.29	4.16
17	1	1e	3.32	0.14
17	1	2e	3.38	1.68
17	2	1e	3.63	0.41
17	2	2e	3.37	3.88
17	3	1e	3.53	3.82
17	3	2e	3.34	3.48
17	5	1e	4.11	0.77



H	K	L	FOBS	FCLC
2	9	-1	1.00	2.30
2	9	0*	1.04	1.05
2	9	1	1.50	1.17
2	9	2	1.51	1.57
2	9	3*	1.21	0.80
2	9	4	1.84	1.85
2	9	5*	0.96	0.80
2	9	6	2.80	2.40
2	9	7*	1.07	0.51
2	10	-8*	1.05	0.53
2	10	-7*	1.23	0.22
2	10	-6	3.77	4.05
2	10	-5	3.02	2.63
2	10	-4	4.32	3.91
2	10	-3	3.67	4.02
2	10	-2	23.67	24.12
2	10	-1	2.31	1.93
2	10	0	7.44	7.76
2	10	1*	0.84	0.28
2	10	2	10.30	12.10
2	10	3*	0.90	0.69
2	10	4*	1.42	2.20
2	10	5*	1.31	1.98
2	10	6	2.73	2.32
2	10	7*	1.00	0.83
2	11	-8	2.16	1.45
2	11	-7*	1.04	1.14
2	11	-6	4.29	4.73
2	11	-5	4.91	4.43
2	11	-4	2.61	3.45
2	11	-3	2.20	1.90
2	11	-2	17.08	12.47
2	11	-1	11.05	12.17
2	11	0	1.33	1.72
2	11	1	1.98	2.32
2	11	2	4.66	4.55
2	11	3*	1.33	1.35
2	11	4*	1.20	1.02
2	11	5	4.58	4.51
2	11	6	[illegible]	3.11
2	12	-8*	1.09	0.71
2	12	-7*	1.04	1.11
2	12	-6*	1.02	1.25
2	12	-5*	1.25	1.06
2	12	-4*	0.94	0.75
2	12	-3	8.25	9.02
2	12	-2	3.94	4.13
2	12	-1	6.57	6.49
2	12	0*	1.00	0.82
2	12	1	3.69	4.31
2	12	2	2.49	3.03
2	12	3	3.62	5.19
2	12	4*	0.96	0.71
2	12	5	2.36	2.05
2	12	6*	1.08	0.72
2	13	-7*	1.50	1.07
2	13	-6*	1.04	0.05
2	13	-5	1.04	1.62
2	13	-4*	0.97	0.31
2	13	-3	3.98	4.37
2	13	-2*	0.95	0.45
2	13	-1	3.23	3.56
2	13	0*	0.90	1.53
2	13	1*	0.91	1.02
2	13	2*	0.96	0.07
2	13	3*	0.96	0.11
2	13	4	1.76	1.95
2	13	5*	1.37	2.01
2	14	-7	2.16	1.68
2	14	-6*	1.67	1.30
2	14	-5*	1.01	0.32
2	14	-4*	0.97	0.20

H	K	L	FOBS	FCLC
2	14	-3*	0.98	0.74
2	14	-2	2.06	3.08
2	14	-1	1.04	1.64
2	14	0	2.30	2.09
2	14	1	1.70	0.26
2	14	2	2.61	3.02
2	14	3*	1.26	1.75
2	14	4	3.39	2.55
2	14	5*	1.52	0.33
2	15	-6*	1.24	0.81
2	15	-5*	1.50	0.85
2	15	-4	1.80	1.41
2	15	-3*	1.34	1.90
2	15	-2*	0.97	0.40
2	15	-1*	0.98	0.61
2	15	0	4.45	4.07
2	15	1*	0.95	0.05
2	15	2*	1.14	0.66
2	15	3*	1.02	0.98
2	15	4	5.68	4.77
2	16	-5*	1.07	0.39
2	16	-4	3.25	3.45
2	16	-3	2.52	2.56
2	16	-2*	1.01	1.06
2	16	-1*	1.01	1.04
2	16	0	1.74	1.01
2	16	1	2.15	2.01
2	16	2*	1.00	0.08
2	16	3	3.41	3.38
2	16	4*	1.49	1.60
2	17	-4*	1.07	0.41
2	17	-3*	1.06	0.05
2	17	-2*	1.03	0.39
2	17	-1	3.34	3.96
2	17	0*	1.53	1.62
2	17	1	2.15	1.05
2	17	2*	1.66	0.59
2	17	3	4.09	3.99
2	18	-3	2.60	3.05
2	18	-2*	1.05	1.78
2	18	-1*	1.05	0.56
2	18	0*	1.04	0.06
2	18	1*	1.09	0.14
3	0	-10	3.04	2.45
3	0	-8*	1.20	0.05
3	0	-6	3.74	4.10
3	0	-4	33.56	32.10
3	0	-2	11.31	8.10
3	0	0	38.04	38.92
3	0	2	6.65	4.88
3	0	4	1.91	2.24
3	0	6	4.09	1.64
3	1	-10	2.29	1.17
3	1	-9	1.99	1.73
3	1	-8	2.50	2.16
3	1	-7	2.81	2.94
3	1	-6	0.20	0.47
3	1	-5	1.34	1.42
3	1	-4	9.98	9.62
3	1	-3	22.84	23.31
3	1	-2	43.84	41.73
3	1	-1	2.33	2.83
3	1	0	3.57	2.52
3	1	1	10.73	11.20
3	1	2	4.36	4.84
3	1	3*	0.81	1.08
3	1	4	6.58	6.93
3	1	5	1.68	1.99
3	1	6	2.65	2.68
3	1	7*	1.10	0.68
3	2	-10	2.01	2.08
3	2	-9*	1.12	1.62

H	K	L	FOBS	FCLC
3	2	-8*	1.10	2.12
3	2	-7*	1.14	1.40
3	2	-6	6.00	6.06
3	2	-5	4.59	4.29
3	2	-4	8.64	9.32
3	2	-3	30.07	30.01
3	2	-2	11.49	10.02
3	2	-1*	0.98	0.39
3	2	0*	0.98	1.34
3	2	1	21.00	20.16
3	2	2	5.10	5.01
3	2	3	6.58	6.60
3	2	4*	0.96	0.20
3	2	5*	1.30	1.07
3	2	6	2.00	1.60
3	2	7	1.05	2.14
3	3	-10	2.29	1.95
3	3	-9*	1.03	0.34
3	3	-8	5.98	6.23
3	3	-7	3.37	3.24
3	3	-6	1.00	2.36
3	3	-5	3.34	3.49
3	3	-4	6.46	5.74
3	3	-3	13.30	11.41
3	3	-2	7.17	8.14
3	3	-1	6.42	6.03
3	3	0	2.33	2.35
3	3	1	5.35	4.96
3	3	2	2.75	2.68
3	3	3	7.94	7.91
3	3	4	3.12	3.53
3	3	5	1.62	1.53
3	3	6*	0.99	0.33
3	3	7	1.92	1.80
3	4	-10	2.35	2.01
3	4	-9	2.91	3.19
3	4	-8*	1.53	1.95
3	4	-7	3.33	3.07
3	4	-6	3.56	3.72
3	4	-5	6.54	5.04
3	4	-4	7.02	5.73
3	4	-3*	1.04	2.04
3	4	-2	5.30	4.00
3	4	-1	5.00	4.41
3	4	0	8.42	10.11
3	4	1	4.10	4.47
3	4	2	6.16	7.11
3	4	3*	1.23	1.60
3	4	4	2.98	2.74
3	4	5*	1.14	0.86
3	4	6	3.84	3.58
3	4	7*	1.06	0.97
3	5	-10	2.29	1.94
3	5	-9	1.96	2.14
3	5	-8	7.02	7.97
3	5	-7*	1.15	1.21
3	5	-6	7.73	8.12
3	5	-5	5.96	6.66
3	5	-4	6.57	6.20
3	5	-3	2.70	2.09
3	5	-2	14.38	13.98
3	5	-1*	0.60	1.05
3	5	0	6.73	7.00
3	5	1*	0.74	0.81
3	5	2	21.63	21.39
3	5	3*	0.98	1.59
3	5	4	7.75	8.04
3	5	5*	0.95	0.04
3	5	6	3.79	3.78
3	5	7*	1.09	0.25
3	6	-9	4.75	4.93
3	6	-8	4.36	4.36

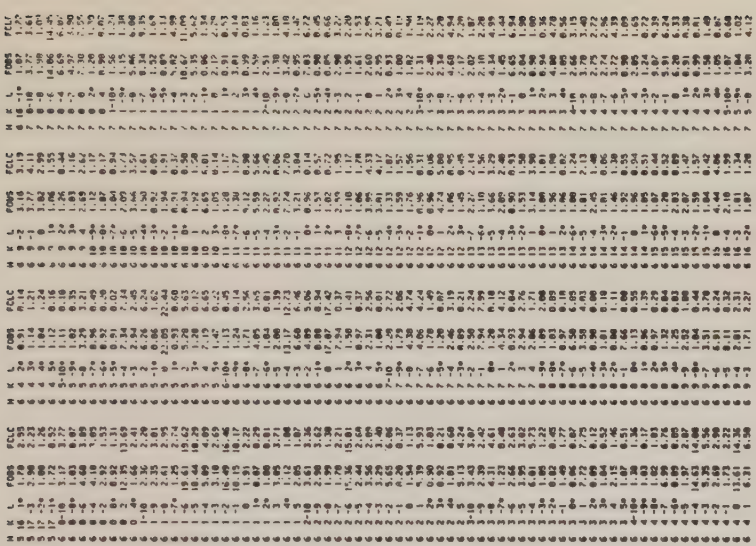
H	K	L	FOBS	FCLC
3	6	-7*	0.94	0.11
3	6	-6	2.30	2.50
3	6	-5	11.13	10.77
3	6	-4	9.72	8.26
3	6	-3*	1.02	1.57
3	6	-2	4.32	4.92
3	6	-1	2.36	1.00
3	6	0	16.74	14.89
3	6	1*	0.76	1.04
3	6	2	11.54	11.29
3	6	3*	0.91	0.96
3	6	4	6.68	7.00
3	6	5*	1.33	0.12
3	6	6	3.36	3.63
3	6	7*	1.09	1.02
3	7	-9*	1.10	0.00
3	7	-8	5.70	5.19
3	7	-7	2.39	2.67
3	7	-6	1.97	1.64
3	7	-5	5.42	6.49
3	7	-4	3.01	2.64
3	7	-3	1.30	1.67
3	7	-2	8.52	7.96
3	7	-1	16.41	14.70
3	7	0	3.30	5.20
3	7	1*	1.25	2.45
3	7	2	3.95	5.46
3	7	3	17.47	18.17
3	7	4	3.50	3.54
3	7	5*	1.01	0.33
3	7	6*	1.19	0.20
3	7	7	3.12	2.91
3	8	-9	4.00	3.97
3	8	-8	4.37	4.59
3	8	-7*	0.97	0.26
3	8	-6*	0.93	0.91
3	8	-5	3.77	3.46
3	8	-4	4.30	3.90
3	8	-3*	0.81	0.59
3	8	-2*	1.12	1.13
3	8	-1	7.58	7.37
3	8	0*	0.77	0.47
3	8	1	3.37	2.40
3	8	2	2.04	2.04
3	8	3	3.61	3.63
3	8	4*	0.92	0.00
3	8	5*	0.97	0.45
3	8	6*	1.05	0.36
3	9	-9	2.44	2.99
3	9	-8*	1.55	1.51
3	9	-7*	1.00	0.01
3	9	-6	1.02	1.76
3	9	-5*	0.91	0.20
3	9	-4	7.71	7.68
3	9	-3*	0.85	1.50
3	9	-2	3.95	3.77
3	9	-1	1.77	2.05
3	9	0*	1.26	1.57
3	9	1*	0.84	0.66
3	9	2*	0.88	0.07
3	9	3*	0.92	0.69
3	9	4*	0.97	0.00
3	9	5*	0.99	0.35
3	9	6*	1.06	0.70
3	10	-8*	1.04	0.30
3	10	-7*	1.01	1.35
3	10	-6	2.10	2.20
3	10	-5*	0.95	1.22
3	10	-4	9.45	10.22
3	10	-3	3.90	4.41
3	10	-2*	0.80	1.39
3	10	-1*	1.42	2.19

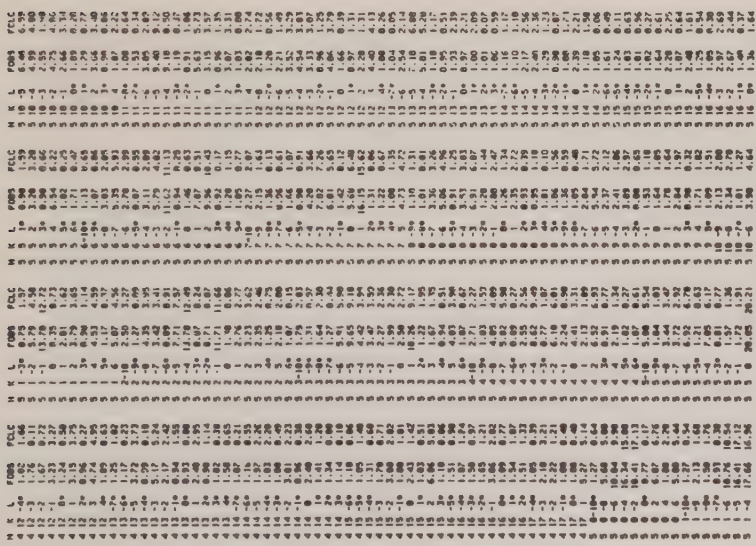
H	K	L	FOBS	FCLC
3	10	0	5.74	5.09
3	10	1*	0.90	1.55
3	10	2	1.84	1.84
3	10	3*	1.04	1.40
3	10	4	1.79	1.94
3	10	5*	1.21	0.13
3	10	6	3.33	3.13
3	11	-8*	1.09	0.60
3	11	-7	2.92	2.83
3	11	-6	3.57	3.43
3	11	-5*	0.93	0.79
3	11	-4*	1.16	0.00
3	11	-3	10.94	10.73
3	11	-2	14.40	13.74
3	11	-1*	0.80	0.07
3	11	0*	1.20	0.92
3	11	1	4.92	4.96
3	11	2	3.05	3.50
3	11	3*	0.95	1.04
3	11	4	4.84	4.26
3	11	5	2.05	1.08
3	11	6	2.42	1.16
3	12	-8*	1.00	0.86
3	12	-7*	1.04	0.99
3	12	-6	3.01	2.72
3	12	-5*	1.16	0.43
3	12	-4	5.30	4.84
3	12	-3	12.84	12.70
3	12	-2	2.68	3.45
3	12	-1	2.45	2.03
3	12	0	2.26	2.09
3	12	1	6.37	7.13
3	12	2*	0.95	0.05
3	12	3*	0.96	0.29
3	12	4*	1.10	0.27
3	12	5	3.44	3.55
3	13	-7	3.11	3.06
3	13	-6*	1.02	0.71
3	13	-5*	0.95	0.64
3	13	-4	1.10	1.94
3	13	-3	7.63	7.49
3	13	-2	2.98	3.50
3	13	-1	2.15	2.61
3	13	0*	0.92	0.00
3	13	1*	1.17	0.20
3	13	2*	0.97	1.27
3	13	3	1.00	2.77
3	13	4*	1.05	0.27
3	13	5*	1.10	0.22
3	14	-7*	1.35	1.44
3	14	-6	1.76	0.46
3	14	-5*	0.99	0.19
3	14	-4*	0.90	0.05
3	14	-3*	1.35	0.93
3	14	-2	4.10	4.13
3	14	-1*	0.95	0.56
3	14	0*	1.00	0.70
3	14	1	1.90	2.20
3	14	2*	1.21	2.01
3	14	3*	1.04	0.39
3	14	4*	1.05	1.03
3	15	-6*	1.52	1.95
3	15	-5	3.03	2.24
3	15	-4*	0.90	0.34
3	15	-3*	0.90	0.13
3	15	-2*	1.43	1.04
3	15	-1*	1.20	0.40
3	15	0*	1.36	1.33
3	15	1*	0.90	0.20
3	15	2	2.60	2.09
3	15	3*	1.53	0.30
3	15	4	2.90	2.70

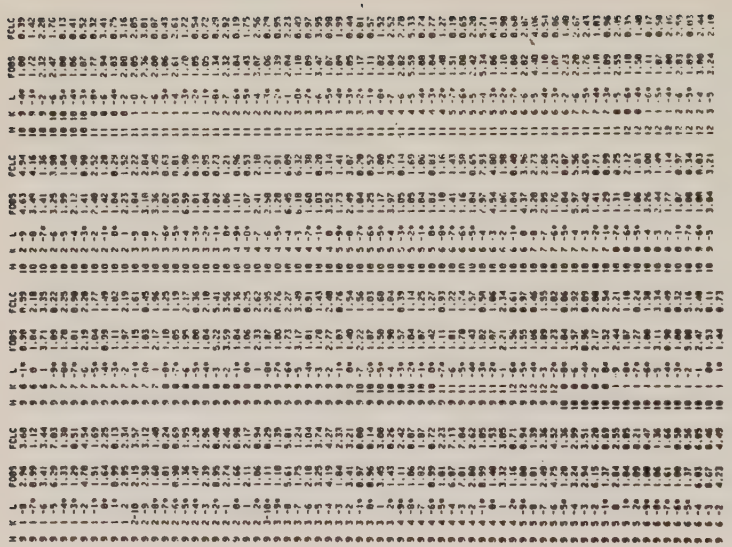
H	K	L	FOBS	FCLC
3	16	-5	2.96	2.36
3	16	-4	2.77	2.56
3	16	-3*	1.01	0.39
3	16	-2*	1.61	1.00
3	16	-1*	1.66	1.31
3	16	0	3.91	2.93
3	16	1*	1.05	0.42
3	16	2	4.01	3.43
3	16	3*	1.66	0.00
3	17	-4*	1.30	0.13
3	17	-3*	1.10	2.12
3	17	-2*	1.03	1.10
3	17	-1	4.66	4.50
3	17	0*	1.04	0.41
3	17	1*	1.07	0.12
3	17	2*	1.09	1.07
3	18	-3*	1.00	1.69
3	18	-2*	1.05	0.16
3	18	-1	2.11	1.53
3	18	0*	1.06	0.29
4	0	-10*	1.96	0.07
4	0	-8*	1.01	1.21
4	0	-6	3.59	2.93
4	0	-4	26.05	24.19
4	0	-2	13.39	11.12
4	0	0	30.05	29.91
4	0	2	3.25	2.91
4	0	4	10.13	11.55
4	0	6	2.17	1.20
4	1	-10*	1.25	0.14
4	1	-9*	1.73	0.60
4	1	-8	0.52	0.07
4	1	-7	5.19	5.03
4	1	-6	5.67	5.49
4	1	-5	4.34	5.62
4	1	-4	45.26	42.25
4	1	-3	32.96	32.52
4	1	-2	9.57	8.40
4	1	-1	5.00	3.03
4	1	0	22.91	22.90
4	1	1	6.24	5.57
4	1	2	1.79	1.69
4	1	3	4.41	4.43
4	1	4	3.09	4.23
4	1	5	3.00	3.65
4	1	6*	1.01	1.24
4	1	7	3.31	3.25
4	2	-10*	1.66	2.00
4	2	-9*	1.12	1.31
4	2	-8	4.20	4.29
4	2	-7*	0.92	0.77
4	2	-6*	1.00	2.13
4	2	-5	4.33	3.50
4	2	-4	13.42	14.70
4	2	-3	13.22	12.07
4	2	-2	2.17	2.07
4	2	-1	2.12	2.19
4	2	0*	0.80	0.27
4	2	1	15.44	17.50
4	2	2	1.04	1.43
4	2	3	7.67	9.01
4	2	4*	0.90	0.22
4	2	5*	0.94	0.09
4	2	6*	1.02	0.19
4	2	7	2.62	2.98
4	3	-10	5.66	5.77
4	3	-9	2.91	2.22
4	3	-8	2.21	2.49
4	3	-7	3.57	4.10
4	3	-6	5.44	5.79
4	3	-5	5.46	4.02
4	3	-4	1.99	1.57

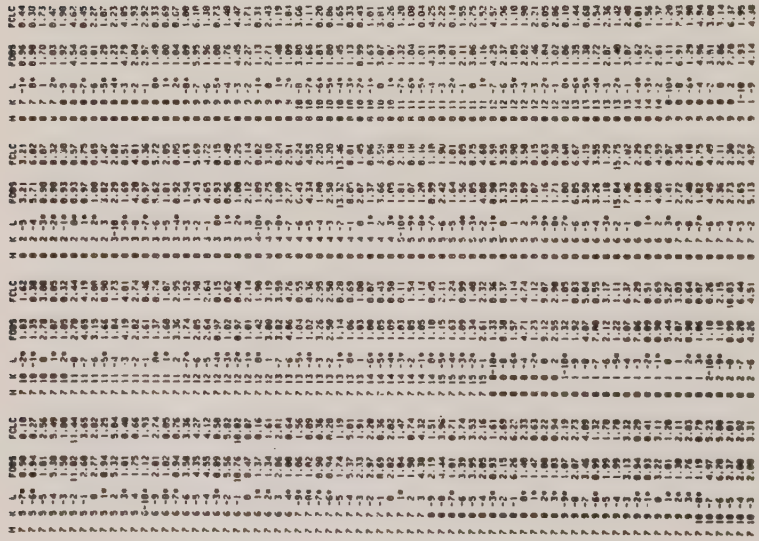
H	K	L	FOBS	FCLC
4	3	-3	2.30	3.05
4	3	-2*	0.67	0.67
4	3	-1*	1.00	0.40
4	3	0*	1.00	1.09
4	3	1	5.24	6.91
4	3	2	3.40	3.06
4	3	3	5.12	5.11
4	3	4*	0.91	1.06
4	3	5*	0.97	0.00
4	3	6*	1.45	1.00
4	3	7*	1.99	1.34
4	4	-10	3.06	3.77
4	4	-9	6.31	6.80
4	4	-8	3.12	2.79
4	4	-7	2.61	2.31
4	4	-6	7.27	6.03
4	4	-5	12.26	10.76
4	4	-4*	0.75	2.17
4	4	-3*	0.81	1.69
4	4	-2	17.17	15.09
4	4	-1	4.03	4.53
4	4	0*	0.84	1.05
4	4	1	2.56	2.95
4	4	2*	0.84	1.72
4	4	3	3.55	4.08
4	4	4	2.70	2.03
4	4	5*	0.97	1.12
4	4	6	7.84	2.22
4	4	7*	1.11	0.80
4	5	-10	3.42	3.89
4	5	-9	2.35	2.20
4	5	-8*	1.32	0.40
4	5	-7*	0.92	0.72
4	5	-6	1.59	1.69
4	5	-5*	1.10	1.01
4	5	-4*	0.70	0.30
4	5	-3	3.40	4.37
4	5	-2	30.52	27.64
4	5	-1	3.05	3.13
4	5	0	13.06	12.56
4	5	1*	0.80	2.02
4	5	2	34.33	36.15
4	5	3*	0.91	0.47
4	5	4	5.31	5.55
4	5	5*	0.90	0.79
4	5	6	6.78	6.41
4	6	-10	4.10	4.23
4	6	-9	4.55	4.52
4	6	-8*	1.09	1.39
4	6	-7*	0.95	1.73
4	6	-6	9.31	8.75
4	6	-5	9.45	9.06
4	6	-4*	0.79	0.58
4	6	-3*	1.22	1.26
4	6	-2	13.51	13.12
4	6	-1	9.03	7.95
4	6	0	4.27	3.40
4	6	1	4.26	4.14
4	6	2	6.62	6.16
4	6	3	6.04	6.43
4	6	4*	0.95	0.60
4	6	5*	0.99	1.11
4	6	6*	1.09	0.90
4	7	-9	4.24	4.59
4	7	-8	3.17	2.99
4	7	-7	3.55	3.43
4	7	-6	6.60	6.60
4	7	-5	1.50	2.93
4	7	-4*	1.21	1.13
4	7	-3	5.19	5.20
4	7	-2	2.37	1.05
4	7	-1*	0.81	0.16

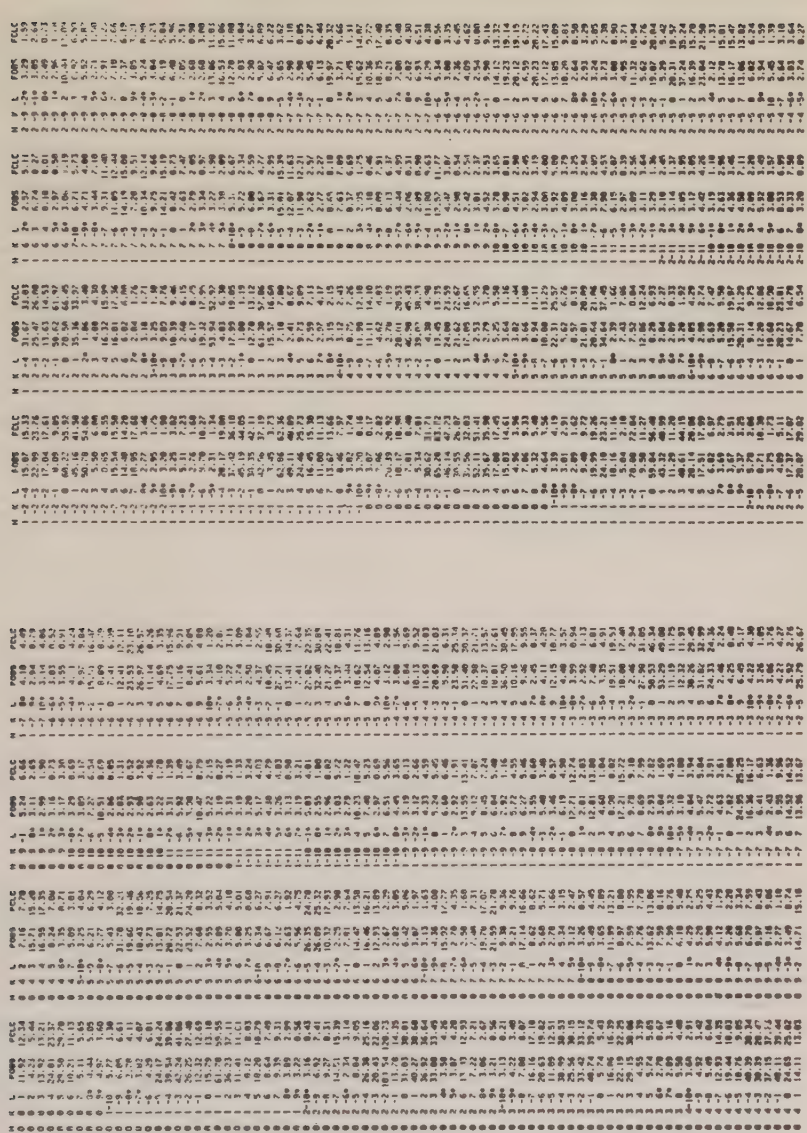
H	K	L	FOBS	FCLC
4	7	0*	0.80	1.10
4	7	1	14.16	15.29
4	7	2	5.13	5.14
4	7	3	5.61	6.01
4	7	4*	0.96	0.40
4	7	5	3.27	3.25
4	7	6	2.29	2.08
4	8	-9*	1.09	1.36
4	8	-8	3.69	4.13
4	8	-7*	1.08	0.80
4	8	-6*	0.93	0.75
4	8	-5	3.90	3.53
4	8	-4	4.89	5.90
4	8	-3	8.73	8.61
4	8	-2*	0.90	0.35
4	8	-1	1.80	1.15
4	8	0*	1.03	0.21
4	8	1	6.97	7.10
4	8	2	1.46	0.43
4	8	3	2.13	1.07
4	8	4*	0.96	0.13
4	8	5*	1.36	1.22
4	8	6*	1.05	0.36
4	9	-9	2.51	2.65
4	9	-8	3.02	2.60
4	9	-7	2.25	2.13
4	9	-6*	0.95	1.45
4	9	-5	4.00	4.37
4	9	-4	12.77	11.98
4	9	-3	6.64	6.60
4	9	-2	3.30	2.20
4	9	-1	2.72	2.05
4	9	0	2.21	2.44
4	9	1	1.06	1.57
4	9	2	3.05	3.17
4	9	3*	1.24	1.24
4	9	4	2.05	1.91
4	9	5*	1.06	1.09
4	9	6	2.13	2.27
4	10	-9*	1.11	1.22
4	10	-8*	1.00	0.57
4	10	-7	2.71	2.56
4	10	-6	1.64	0.50
4	10	-5	2.53	1.72
4	10	-4	8.00	8.03
4	10	-3	4.14	4.39
4	10	-2	4.01	5.11
4	10	-1	1.55	0.20
4	10	0	6.07	0.30
4	10	1*	0.89	0.18
4	10	2*	1.23	1.80
4	10	3*	0.95	0.07
4	10	4	5.75	5.10
4	10	5*	1.04	0.39
4	11	-8	3.69	3.59
4	11	-7	2.93	2.81
4	11	-6	2.51	2.75
4	11	-5*	1.37	1.21
4	11	-4	15.21	14.64
4	11	-3	9.09	10.47
4	11	-2	3.10	2.98
4	11	-1*	0.89	0.39
4	11	0	8.33	8.21
4	11	1	2.98	3.75
4	11	2*	0.93	0.36
4	11	3	3.61	3.48
4	11	4	2.13	2.17
4	11	5	2.29	2.18
4	12	-8*	1.08	0.82
4	12	-7*	1.47	0.79
4	12	-6*	1.02	1.01
4	12	-5	4.47	4.60











H	K	L	FOBS	FCLC
2	-4	-4	11.05	9.50
2	-4	-3	15.53	15.70
2	-4	-2	17.13	17.20
2	-4	-1	12.21	12.79
2	-4	0	10.32	8.93
2	-4	1	12.00	11.50
2	-4	2	47.52	44.62
2	-4	3	32.93	31.70
2	-4	4	14.67	16.53
2	-4	5*	3.05	3.00
2	-4	6	11.07	12.60
2	-4	7	13.67	13.14
2	-4	8	11.74	11.50
2	-4	9*	2.80	1.49
2	-4	10*	4.54	0.04
2	-3	-8*	3.14	2.62
2	-3	-7*	3.70	4.77
2	-3	-6	9.95	9.79
2	-3	-5*	2.50	1.12
2	-3	-4	10.15	10.23
2	-3	-3	17.13	18.26
2	-3	-2	36.31	37.12
2	-3	-1	42.77	45.00
2	-3	0	3.24	2.29
2	-3	1	6.11	5.17
2	-3	2	29.90	30.47
2	-3	3	41.57	42.90
2	-3	4	25.72	25.00
2	-3	5	14.81	13.29
2	-3	6*	2.20	0.26
2	-3	7	12.49	12.03
2	-3	8	7.26	7.10
2	-3	9	6.22	6.22
2	-3	10*	3.24	2.17
2	-2	-8*	4.16	0.13
2	-2	-7	4.94	3.54
2	-2	-6	15.50	14.20
2	-2	-5	13.30	12.37
2	-2	-4	7.80	7.11
2	-2	-3	6.07	5.57
2	-2	-2	10.20	12.42
2	-2	-1	20.43	29.74
2	-2	0	61.02	56.40
2	-2	1	30.17	27.60
2	-2	2	7.75	6.69
2	-2	3	10.57	10.69
2	-2	4	32.04	32.75
2	-2	5	22.77	21.41
2	-2	6	14.73	14.01
2	-2	7*	3.02	1.59
2	-2	8	6.56	5.21
2	-2	9*	2.90	4.10
2	-2	10	6.90	4.95
2	-1	-9*	4.07	2.92
2	-1	-8	5.59	4.43
2	-1	-7	4.07	5.44
2	-1	-6*	2.53	1.30
2	-1	-5	19.06	20.90
2	-1	-4	31.76	32.33
2	-1	-3	31.20	29.00
2	-1	-2	30.46	30.04
2	-1	-1	22.23	22.13
2	-1	0	65.20	59.05
2	-1	1	77.39	71.36
2	-1	2	17.03	18.04
2	-1	3	5.00	6.42
2	-1	4	20.03	20.27
2	-1	5	20.41	20.41
2	-1	6	12.17	12.40
2	-1	7	6.63	5.07
2	-1	8*	4.67	1.10
2	-1	9*	4.41	3.75
2	-1	10*	3.27	1.59
2	0	-9*	3.16	2.95
2	0	-8	9.50	10.62
2	0	-7*	3.02	3.59
2	0	-6	6.05	5.51
2	0	-5	20.92	19.11
2	0	-4	22.76	22.66
2	0	-3	33.46	33.40

H	K	L	FOBS	FCLC
2	0	-2	27.53	26.23
2	0	-1	3.55	3.73
2	0	0	50.00	43.07
2	0	1	44.50	39.90
2	0	2	30.99	37.22
2	0	3	10.43	11.63
2	0	4	7.69	7.13
2	0	5	14.25	15.46
2	0	6	13.75	13.73
2	0	7	6.60	6.59
2	0	8	6.65	6.33
2	0	9*	3.17	1.06
2	1	-10*	3.31	0.21
2	1	-9	8.06	6.90
2	1	-8*	4.49	3.70
2	1	-7	12.11	12.74
2	1	-6	11.27	13.47
2	1	-5	4.51	4.37
2	1	-4	37.62	37.50
2	1	-3	33.65	33.00
2	1	-2	46.66	44.94
2	1	-1	51.41	51.30
2	1	0	13.60	12.41
2	1	1	45.03	42.99
2	1	2	40.49	39.47
2	1	3	30.50	36.70
2	1	4	6.99	8.64
2	1	5*	2.51	2.60
2	1	6	8.78	9.45
2	1	7	7.65	8.10
2	1	8*	3.04	3.00
2	1	9*	3.20	1.07
2	2	-10*	3.37	4.95
2	2	-9*	2.92	2.44
2	2	-8	7.66	9.20
2	2	-7	16.60	17.33
2	2	-6	14.74	13.57
2	2	-5	14.91	13.56
2	2	-4	8.00	8.02
2	2	-3	26.95	29.32
2	2	-2	52.74	51.11
2	2	-1	36.06	36.76
2	2	0	20.90	19.67
2	2	1	23.70	22.17
2	2	2	7.09	8.29
2	2	3	20.10	20.33
2	2	4	16.04	17.39
2	2	5	4.75	2.47
2	2	6*	4.04	3.38
2	2	7*	2.94	4.55
2	2	8*	3.16	3.66
2	3	-10*	4.65	1.55
2	3	-9*	3.99	3.30
2	3	-8*	3.50	0.36
2	3	-7	7.44	7.96
2	3	-6	25.27	20.09
2	3	-5	22.27	21.40
2	3	-4	11.60	12.75
2	3	-3	6.90	3.96
2	3	-2	34.11	32.92
2	3	-1	41.73	45.50
2	3	0	30.92	37.23
2	3	1	21.50	21.72
2	3	2	5.10	4.40
2	3	3	14.24	15.20
2	3	4	16.33	17.75
2	3	5	8.63	9.29
2	3	6*	4.29	1.06
2	3	7*	3.00	0.14
2	3	8	7.11	2.99
2	4	-10	7.01	6.09
2	4	-9	9.27	8.31
2	4	-8*	2.71	1.31
2	4	-7*	2.61	0.90
2	4	-6	16.54	18.45
2	4	-5	25.27	24.09
2	4	-4	30.40	31.39
2	4	-3	10.23	12.92
2	4	-2	7.12	6.93
2	4	-1	30.45	40.11

H	K	L	FOBS	FCLC
2	4	0	15.93	16.56
2	4	1	23.97	22.44
2	4	2	11.00	9.49
2	4	3	5.99	7.84
2	4	4*	3.36	3.34
2	4	5	7.31	7.30
2	4	6*	4.03	3.95
2	4	7*	3.62	1.45
2	5	-10*	3.20	3.05
2	5	-9	8.70	6.98
2	5	-8	11.77	12.47
2	5	-7*	4.60	5.05
2	5	-6*	4.41	7.12
2	5	-5	14.74	13.19
2	5	-4	20.79	26.00
2	5	-3	21.74	23.29
2	5	-2	15.57	14.73
2	5	-1*	2.20	2.21
2	5	0	10.16	17.40
2	5	1	19.96	19.40
2	5	2	17.40	17.00
2	5	3	5.30	4.54
2	5	4*	2.70	2.47
2	5	5*	2.06	2.49
2	5	6*	4.37	5.05
2	6	-10*	3.24	3.55
2	6	-9*	3.06	3.90
2	6	-8	12.33	12.30
2	6	-7	9.66	10.93
2	6	-6*	4.72	0.70
2	6	-5	4.29	5.29
2	6	-4	17.43	16.77
2	6	-3	33.90	32.39
2	6	-2	9.06	9.95
2	6	-1	5.09	7.36
2	6	0*	2.22	2.64
2	6	1	14.71	15.01
2	6	2	7.60	6.96
2	6	3	6.71	6.17
2	6	4*	3.29	0.94
2	6	5*	3.04	0.12
2	6	6*	3.19	2.05
2	7	-10	5.05	2.29
2	7	-9*	3.99	1.22
2	7	-8	10.22	9.40
2	7	-7	9.64	10.52
2	7	-6	8.66	12.00
2	7	-5*	3.07	3.70
2	7	-4*	2.54	1.17
2	7	-3	11.55	13.06
2	7	-2	16.10	15.65
2	7	-1	9.29	11.36
2	7	0	9.14	8.06
2	7	1*	2.09	2.06
2	7	2*	2.07	5.05
2	7	3*	4.34	3.37
2	7	4*	4.61	4.09
2	7	5*	3.12	0.66
2	8	-10*	5.45	4.53
2	8	-9*	3.11	1.31
2	8	-8*	3.24	1.32
2	8	-7	7.72	7.90
2	8	-6	9.64	11.12
2	8	-5	14.54	15.53
2	8	-4*	3.14	0.65
2	8	-3*	2.77	3.91
2	8	-2	5.31	7.03
2	8	-1	10.46	13.30
2	8	0	5.30	4.65
2	8	1*	4.61	1.90
2	8	2*	3.37	3.00
2	8	3*	2.93	1.44
2	8	4*	3.12	2.57
2	9	-9*	3.37	3.69
2	9	-8*	3.77	2.15
2	9	-7	6.11	4.30
2	9	-6	6.64	4.20
2	9	-5	9.50	9.70
2	9	-4	6.71	7.10
2	9	-3*	2.74	1.41

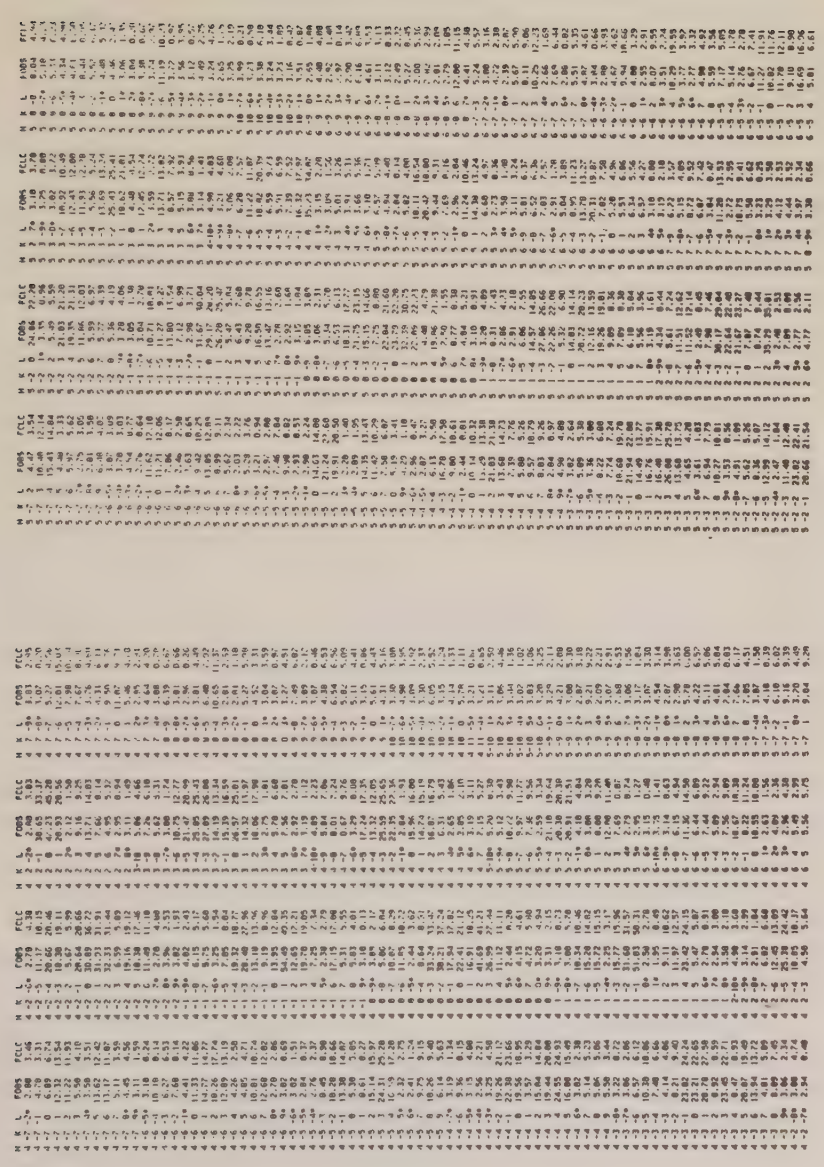
H	K	L	FOBS	FCLC
2	9	-2*	3.54	0.42
2	9	-1*	3.10	4.06
2	9	0	6.33	5.50
2	9	1*	2.90	1.75
2	9	2*	3.06	2.59
2	10	-8*	4.41	4.01
2	10	-7*	4.70	3.02
2	10	-6*	4.50	3.75
2	10	-5	6.90	5.57
2	10	-4	7.47	5.59
2	10	-3	7.20	6.59
2	10	-2	5.16	0.59
2	10	-1*	3.17	0.93
2	10	0	4.06	4.40
2	10	1*	3.12	1.36
2	11	-7*	3.37	3.92
2	11	-6*	3.20	1.20
2	11	-5*	3.54	2.91
2	11	-4	5.35	2.22
2	11	-3*	3.25	3.39
2	11	-2*	3.17	2.64
3	-11	2*	3.60	2.26
3	-11	3*	3.40	2.55
3	-11	4*	3.13	4.32
3	-11	5	5.56	3.40
3	-11	6*	3.23	1.07
3	-10	0	4.05	4.66
3	-10	1*	3.03	1.50
3	-10	2*	4.21	1.35
3	-10	3*	3.09	2.13
3	-10	4	8.70	6.70
3	-10	5	6.05	5.56
3	-10	6	6.14	4.65
3	-10	7*	3.01	0.38
3	-10	8*	3.19	1.63
3	-9	-2*	3.19	0.76
3	-9	-1*	3.31	1.54
3	-9	0	4.74	6.37
3	-9	1*	2.00	5.31
3	-9	2	5.00	5.61
3	-9	3*	3.52	2.41
3	-9	4	5.07	3.42
3	-9	5	8.91	7.00
3	-9	6*	3.79	6.16
3	-9	7	7.64	6.90
3	-9	8*	3.00	0.32
3	-9	9	5.99	1.47
3	-8	-3*	4.26	5.49
3	-8	-2*	4.53	4.91
3	-8	-1*	2.09	0.19
3	-8	0	5.51	4.39
3	-8	1	7.59	8.42
3	-8	2	12.71	13.06
3	-8	3	8.56	8.13
3	-8	4*	4.28	2.53
3	-8	5	7.47	7.20
3	-8	6	8.87	8.47
3	-8	7	8.60	8.51
3	-8	8	7.60	6.00
3	-8	9*	3.04	1.37
3	-7	-5*	3.00	0.02
3	-7	-4*	4.24	3.41
3	-7	-3*	2.76	1.40
3	-7	-2	8.33	9.41
3	-7	-1	6.60	5.31
3	-7	0*	3.15	0.56
3	-7	1	4.51	5.46
3	-7	2	13.76	13.45
3	-7	3	16.53	16.42
3	-7	4	9.35	7.05
3	-7	5	6.02	5.73
3	-7	6	5.50	6.36
3	-7	7	9.17	8.19
3	-7	8	7.40	7.10
3	-7	9	6.40	5.71
3	-6	-6*	3.00	1.66
3	-6	-5*	3.73	4.60
3	-6	-4*	2.03	1.57
3	-6	-3*	4.41	4.11
3	-6	-2	10.65	11.71

H	K	L	FOBS	FCLC
3	-6	-1	12.11	13.24
3	-6	0	14.97	15.54
3	-6	1*	2.34	2.35
3	-6	2	6.93	8.19
3	-6	3	26.26	24.61
3	-6	4	19.20	18.35
3	-6	5	12.61	12.36
3	-6	6*	2.61	3.56
3	-6	7	9.40	10.23
3	-6	8	7.74	5.97
3	-6	9	6.53	5.54
3	-6	10*	3.20	3.12
3	-5	-6*	4.24	4.99
3	-5	-5*	2.09	2.39
3	-5	-4	8.46	7.63
3	-5	-3*	2.49	0.19
3	-5	-2	10.37	10.73
3	-5	-1	13.33	16.32
3	-5	0	22.26	21.23
3	-5	1	16.14	15.40
3	-5	2*	2.22	2.79
3	-5	3	6.90	7.03
3	-5	4	21.09	20.00
3	-5	5	16.72	17.71
3	-5	6	12.40	11.42
3	-5	7*	4.05	3.44
3	-5	8	5.02	5.20
3	-5	9*	3.05	5.12
3	-5	10	5.37	4.42
3	-4	-7*	3.03	1.94
3	-4	-6*	2.09	2.09
3	-4	-5	5.73	6.45
3	-4	-4	14.07	13.59
3	-4	-3	9.66	9.46
3	-4	-2	4.39	5.36
3	-4	-1	12.46	13.20
3	-4	0	22.33	23.42
3	-4	1	45.43	42.00
3	-4	2	20.72	20.41
3	-4	3	4.71	3.11
3	-4	4	10.29	11.22
3	-4	5	20.59	20.40
3	-4	6	15.10	14.31
3	-4	7	8.00	7.97
3	-4	8*	2.71	1.10
3	-4	9	5.00	3.00
3	-4	10*	3.53	3.09
3	-3	-8*	3.23	4.00
3	-3	-7*	2.95	0.06
3	-3	-6*	2.70	1.56
3	-3	-5	6.09	6.36
3	-3	-4	17.99	18.95
3	-3	-3	18.33	18.79
3	-3	-2	14.64	15.95
3	-3	-1*	1.99	1.50
3	-3	0	29.15	28.29
3	-3	1	32.66	29.49
3	-3	2	32.36	32.77
3	-3	3	14.47	15.50
3	-3	4	3.86	4.03
3	-3	5	9.37	9.94
3	-3	6	16.47	16.62
3	-3	7	9.73	9.87
3	-3	8	7.14	6.57
3	-3	9*	3.00	8.44
3	-3	10*	5.06	2.70
3	-2	-8*	3.16	4.59
3	-2	-7	5.17	4.06
3	-2	-6	8.35	7.97
3	-2	-5	4.29	8.34
3	-2	-4	9.17	9.60
3	-2	-3	24.65	25.00
3	-2	-2	22.79	22.97
3	-2	-1	42.27	41.99
3	-2	0*	2.30	3.03
3	-2	1	22.78	19.59
3	-2	2	33.42	33.04
3	-2	3	50.13	47.05
3	-2	4	14.39	15.20
3	-2	5*	2.90	1.13

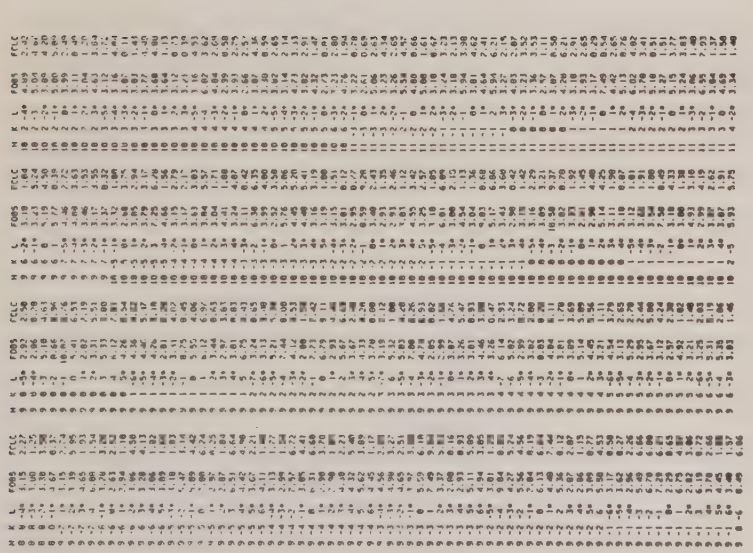
H	K	L	FOBS	FCLC
3	-2	6	10.11	9.57
3	-2	7	11.07	11.00
3	-2	8	7.10	7.89
3	-2	9*	3.43	2.57
3	-2	10*	3.14	1.21
3	-1	-9*	3.10	1.16
3	-1	-8*	4.66	3.01
3	-1	-7	7.19	7.45
3	-1	-6	15.00	15.55
3	-1	-5	10.77	10.37
3	-1	-4*	2.10	0.97
3	-1	-3	22.75	22.71
3	-1	-2	45.00	44.60
3	-1	-1	39.63	40.36
3	-1	0	21.94	19.10
3	-1	1	19.13	15.23
3	-1	2	17.91	18.23
3	-1	3	32.21	32.29
3	-1	4	25.64	26.75
3	-1	5	9.00	7.03
3	-1	6*	3.71	2.15
3	-1	7*	2.66	4.09
3	-1	8	7.42	8.27
3	-1	9*	3.13	1.61
3	0	-9*	3.20	1.39
3	0	-8*	2.95	1.14
3	0	-7	6.07	7.20
3	0	-6	14.02	14.15
3	0	-5	21.60	20.41
3	0	-4	4.76	5.69
3	0	-3	15.42	14.19
3	0	-2	23.04	21.40
3	0	-1	41.79	43.41
3	0	0	43.57	39.77
3	0	1	45.24	44.91
3	0	2*	1.77	0.06
3	0	3	17.19	16.74
3	0	4	24.92	24.32
3	0	5	10.32	17.58
3	0	6	8.73	8.09
3	0	7*	2.77	0.44
3	0	8*	2.95	1.07
3	0	9*	3.95	4.50
3	1	-10*	3.37	3.40
3	1	-9*	3.14	3.09
3	1	-8	5.21	6.59
3	1	-7*	2.72	0.71
3	1	-6	8.40	9.33
3	1	-5	30.23	28.11
3	1	-4	33.42	33.61
3	1	-3	21.52	21.51
3	1	-2	3.33	3.60
3	1	-1	46.15	47.30
3	1	0	37.47	35.77
3	1	1	43.60	41.52
3	1	2	22.79	23.16
3	1	3	11.10	9.94
3	1	4	9.94	10.93
3	1	5	12.90	12.53
3	1	6	12.70	13.06
3	1	7*	2.70	0.63
3	1	8*	3.03	0.36
3	1	9*	4.06	0.56
3	2	-10*	3.30	1.70
3	2	-9	7.25	6.77
3	2	-8	8.51	9.00
3	2	-7	7.41	7.03
3	2	-6	8.00	8.20
3	2	-5	5.90	8.01
3	2	-4	31.79	29.75
3	2	-3	36.66	34.20
3	2	-2	16.40	17.31
3	2	-1	6.03	7.62
3	2	0	24.92	22.20
3	2	1	29.99	27.73
3	2	2	32.27	30.62
3	2	3	13.26	12.20
3	2	4*	2.35	0.32
3	2	5	4.63	5.00
3	2	6	5.59	6.60

H	K	L	FOBS	FCLC
3	2	7	7.11	7.02
3	2	8*	3.15	1.70
3	3	-10*	3.24	0.44
3	3	-9*	4.27	4.76
3	3	-8	8.14	8.45
3	3	-7	15.93	17.25
3	3	-6	9.13	11.41
3	3	-5*	2.22	0.05
3	3	-4	19.31	18.21
3	3	-3	43.51	44.06
3	3	-2	30.40	31.18
3	3	-1	19.99	20.39
3	3	0*	1.63	1.26
3	3	1	29.04	29.14
3	3	2	22.26	22.65
3	3	3	13.70	14.13
3	3	4	9.39	11.54
3	3	5	6.34	5.02
3	3	6*	3.65	4.17
3	3	7*	3.10	2.42
3	3	8*	3.20	0.39
3	4	-10*	3.32	2.75
3	4	-9*	3.02	0.52
3	4	-8	10.55	11.13
3	4	-7	9.76	10.69
3	4	-6	13.64	17.52
3	4	-5	9.71	12.21
3	4	-4	7.34	7.22
3	4	-3	15.52	16.33
3	4	-2	29.64	29.91
3	4	-1	19.07	22.05
3	4	0	19.27	18.01
3	4	1*	3.10	2.32
3	4	2	12.67	12.06
3	4	3	8.09	7.92
3	4	4	8.62	7.03
3	4	5	8.12	6.47
3	4	6*	2.97	0.72
3	4	7*	3.19	1.33
3	5	-10	6.01	3.11
3	5	-9	6.95	6.21
3	5	-8*	2.00	1.07
3	5	-7	8.91	9.43
3	5	-6	11.10	16.10
3	5	-5	22.09	24.06
3	5	-4	8.47	10.63
3	5	-3*	2.29	2.00
3	5	-2	14.31	13.67
3	5	-1	27.96	29.62
3	5	0	20.51	18.92
3	5	1	7.03	6.77
3	5	2*	2.60	3.12
3	5	3	10.00	12.05
3	5	4	5.96	7.16
3	5	5	5.07	3.40
3	5	6*	3.24	1.36
3	6	-10	8.90	6.52
3	6	-9	6.35	4.90
3	6	-8	5.20	4.44
3	6	-7*	3.20	1.24
3	6	-6	8.12	12.74
3	6	-5	13.91	16.60
3	6	-4	19.01	18.40
3	6	-3	4.00	5.20
3	6	-2*	2.42	1.02
3	6	-1	9.50	12.95
3	6	0	17.39	16.70
3	6	1	6.94	4.75
3	6	2*	4.19	3.46
3	6	3*	2.75	2.76
3	6	4*	3.49	2.63
3	6	5*	3.76	2.52
3	7	-10	5.97	4.05
3	7	-9	8.93	6.67
3	7	-8	8.50	6.02
3	7	-7	8.16	7.00
3	7	-6*	2.67	2.30
3	7	-5	9.72	10.70
3	7	-4	11.30	12.94
3	7	-3	16.40	16.92

H	K	L	FOBS	FCLC
3	7	-2	8.08	7.36
3	7	-1*	2.62	2.94
3	7	0*	3.39	3.78
3	7	1	12.83	13.12
3	7	2	5.20	5.99
3	7	3*	2.88	2.37
3	7	4*	3.86	3.51
3	8	-9*	3.81	3.88
3	8	-8	8.00	8.15
3	8	-7	7.41	7.17
3	8	-6	6.19	5.81
3	8	-5*	3.49	5.40
3	8	-4	7.79	6.30
3	8	-3	10.06	11.21
3	8	-2	11.69	11.59
3	8	-1*	4.76	1.51
3	8	0*	2.36	2.02
3	8	1*	2.94	1.01
3	8	2*	3.77	3.16
3	8	3*	3.12	2.29
3	9	-9*	3.30	0.73
3	9	-8*	4.37	4.61
3	9	-7	7.65	7.14
3	9	-6	8.36	5.95
3	9	-5	5.90	4.55
3	9	-4*	2.02	1.04
3	9	-3*	3.51	5.95
3	9	-2	6.14	4.18
3	9	-1	7.63	8.48
3	9	0	4.29	2.01
3	9	1*	2.98	0.61
3	9	2*	4.90	4.52
3	10	-8*	3.39	0.26
3	10	-7	7.13	5.04
3	10	-6	7.05	4.60
3	10	-5*	4.74	4.75
3	10	-4*	3.16	4.40
3	10	-3	5.78	4.38
3	10	-2*	4.33	4.08
3	10	-1*	3.17	1.84
3	10	0*	3.00	1.57
3	11	-6*	5.06	2.70
3	11	-5	6.92	3.90
3	11	-4*	3.22	1.43
3	11	-3*	5.13	3.49
3	11	-2*	3.26	0.96
4	-10	0*	3.25	1.19
4	-10	1*	5.12	0.45
4	-10	2*	3.00	3.02
4	-10	3	6.16	6.07
4	-10	4*	3.76	1.94
4	-10	5*	4.10	2.65
4	-10	6*	3.07	1.23
4	-10	7*	3.79	3.63
4	-9	-2*	3.23	1.08
4	-9	-1*	3.22	2.04
4	-9	0	5.44	6.07
4	-9	1*	2.90	1.35
4	-9	2*	2.79	0.89
4	-9	3	7.27	6.56
4	-9	4	8.69	8.89
4	-9	5	8.30	6.22
4	-9	6*	4.34	2.23
4	-9	7*	3.38	2.45
4	-9	8	6.01	4.31
4	-8	-3*	3.42	1.65
4	-8	-2	5.41	4.77
4	-8	-1*	3.01	4.07
4	-8	0	7.66	7.93
4	-8	1	6.21	8.26
4	-8	2*	2.71	1.37
4	-8	3*	3.06	2.75
4	-8	4	8.15	8.30
4	-8	5	10.71	9.07
4	-8	6	5.17	6.26
4	-8	7*	3.41	2.27
4	-8	8*	2.91	1.45
4	-8	9*	4.92	5.27
4	-7	-4*	3.64	2.69
4	-7	-3*	3.00	2.70



H	K	L	FOBS	FCLC
6	-5	5	9.15	0.99
6	-5	6	5.03	4.69
6	-5	7*	2.68	1.59
6	-5	8*	4.08	3.03
6	-4	-6*	3.16	1.79
6	-4	-5	6.69	5.71
6	-4	-4*	4.39	3.08
6	-4	-3	8.57	6.70
6	-4	-2*	4.13	4.35
6	-4	-1	13.06	13.01
6	-4	0	16.99	16.45
6	-4	1*	2.42	2.08
6	-4	2	20.19	21.04
6	-4	3	5.35	4.23
6	-4	4	12.50	13.17
6	-4	5	11.59	11.51
6	-4	6	6.05	6.63
6	-4	7	5.74	3.52
6	-4	8*	2.95	2.06
6	-4	9*	3.03	0.43
6	-3	-7*	3.73	2.33
6	-3	-6*	3.04	1.07
6	-3	-5	7.18	7.51
6	-3	-4	10.17	9.15
6	-3	-3	11.05	10.83
6	-3	-2*	3.79	6.48
6	-3	-1*	2.48	3.79
6	-3	0	25.64	25.23
6	-3	1	27.93	27.34
6	-3	2	8.58	9.08
6	-3	3	6.74	5.05
6	-3	4*	2.58	2.69
6	-3	5	10.30	10.23
6	-3	6	7.60	7.28
6	-3	7	8.77	8.83
6	-3	8*	2.96	0.73
6	-2	-7*	3.11	4.01
6	-2	-6*	[illegible]	0.39
6	-2	-5*	[illegible]	0.49
6	-2	-4	12.12	11.54
6	-2	-3	17.31	18.27
6	-2	-2	13.79	14.48
6	-2	-1	9.52	9.32
6	-2	0	11.54	11.06
6	-2	1	16.94	17.43
6	-2	2	21.95	22.07
6	-2	3	[illegible]	13.40
6	-2	4*	3.16	4.14
6	-2	5	4.07	2.07
6	-2	6	6.46	7.29
6	-2	7*	4.08	2.68
6	-2	8	5.27	4.72
6	-1	-8*	3.23	2.51
6	-1	-7	8.29	7.59
6	-1	-6	6.72	5.48
6	-1	-5*	4.05	3.14
6	-1	-4*	3.98	2.99
6	-1	-3	4.04	5.06
6	-1	-2	34.05	[illegible]
6	-1	-1	22.92	23.08
6	-1	0*	2.57	2.09
6	-1	1	7.34	7.12
6	-1	2	14.08	15.01
6	-1	3	19.02	19.58
6	-1	4	8.33	8.34
6	-1	5	9.92	10.07
6	-1	6	6.06	6.52
6	-1	7	5.32	5.13
6	-1	8*	3.08	2.91
6	0	-8*	5.16	2.55
6	0	-7*	4.91	4.05
6	0	-6	11.21	11.42
6	0	-5	13.11	12.09
6	0	-4*	3.86	3.35
6	0	-3	21.31	20.16
6	0	-2	5.59	4.53
6	0	-1	23.10	23.79
6	0	0	22.58	21.27
6	0	1*	3.24	4.40
6	0	2	7.14	7.42
6	0	3	11.04	12.71
6	0	4	11.59	11.66
6	0	5*	3.16	2.97
6	0	6*	1.35	4.10
6	0	7*	3.18	0.21
6	0	8*	3.15	1.76
6	1	-9*	3.36	4.36
6	1	-8*	4.28	0.58
6	1	-7*	2.09	3.39
6	1	-6	9.51	8.27
6	1	-5	6.70	6.15
6	1	-4	25.38	25.04
6	1	-3	6.19	7.50
6	1	-2	10.04	11.59
6	1	-1	10.32	10.56
6	1	0	22.38	21.73
6	1	1	21.11	20.00
6	1	2*	2.68	0.02
6	1	3	6.25	6.13
6	1	4	14.50	15.18
6	1	5	10.25	9.35
6	1	6*	3.27	3.69
6	1	7*	3.09	1.16
6	2	-9*	3.31	3.11
6	2	-8*	5.13	5.96
6	2	-7*	4.07	4.11
6	2	-6	5.95	5.58
6	2	-5	22.72	21.41
6	2	-4	8.08	9.38
6	2	-3	16.66	16.72
6	2	-2	5.46	6.55
6	2	-1	8.57	9.47
6	2	0	17.93	17.23
6	2	1	20.94	19.99
6	2	2	8.08	7.49
6	2	3*	2.52	2.08
6	2	4*	2.77	0.57
6	2	5*	2.88	3.15
6	2	6*	2.96	3.30
6	2	7	5.62	2.89
6	3	-9*	3.24	4.58
6	3	-8	5.84	6.46
6	3	-7*	2.79	1.42
6	3	-6	10.20	10.77
6	3	-5	7.23	6.18
6	3	-4	17.60	15.83
6	3	-3	18.75	18.17
6	3	-2	14.41	13.62
6	3	-1	6.36	8.04
6	3	0	10.43	11.34
6	3	1*	2.77	1.54
6	3	2	19.73	19.17
6	3	3	10.24	9.53
6	3	4*	2.83	1.67
6	3	5*	3.88	1.39
6	3	6	5.23	1.08
6	4	-9*	3.34	0.79
6	4	-8	6.63	6.87
6	4	-7	12.09	13.41
6	4	-6*	4.33	4.29
6	4	-5	4.94	3.76
6	4	-4	5.32	5.92
6	4	-3	14.53	15.26
6	4	-2	15.93	15.72
6	4	-1	16.47	17.08
6	4	0*	2.13	1.94
6	4	1	7.88	9.34
6	4	2	5.21	5.35
6	4	3	6.55	4.68
6	4	4*	2.92	3.01
6	4	5*	3.47	1.22
6	4	6*	5.31	0.51
6	5	-9*	3.38	2.73
6	5	-8*	3.13	2.28
6	5	-7	8.23	8.78
6	5	-6	11.14	10.91
6	5	-5	8.54	9.02
6	5	-4*	2.63	1.58
6	5	-3*	3.54	3.83
6	5	-2	16.40	15.77
6	5	-1*	2.73	1.88
6	5	0	15.54	14.46
6	5	1	6.32	4.46
6	5	2*	2.83	1.94
6	5	3	5.93	7.09
6	5	4*	3.04	1.83
6	5	5*	3.10	1.63
6	6	-9*	5.31	4.85
6	6	-8*	3.17	0.92
6	6	-7*	3.07	3.48
6	6	-6	8.24	7.90
6	6	-5	11.25	10.56
6	6	-4	7.40	6.55
6	6	-3	8.17	8.49
6	6	-2	7.21	9.85
6	6	1	7.33	11.64
6	6	0	6.20	5.89
6	6	1*	1.71	2.31
6	6	2*	2.99	0.80
6	6	3	5.77	1.64
6	6	4*	3.10	1.43
6	7	-9*	4.32	5.07
6	7	-8	5.72	3.72
6	7	-7	5.13	1.54
6	7	-6*	3.03	4.54
6	7	-5	6.85	6.58
6	7	-4	10.04	10.80
6	7	-3*	2.89	2.24
6	7	-2	5.26	5.92
6	7	-1	5.40	1.08
6	7	0*	3.05	3.88
6	7	1	7.40	6.60
6	7	2*	2.98	1.03
6	7	3*	3.12	0.89
6	8	-8	5.75	4.05
6	8	-7*	4.68	3.86
6	8	-6*	4.12	0.93
6	8	-5*	3.05	2.64
6	8	-4	8.59	10.14
6	8	-3	7.14	7.95
6	8	-2*	3.02	2.69
6	8	-1*	3.08	1.15
6	8	0*	2.58	0.97
6	8	1	5.75	3.27
6	8	2*	3.16	1.46
6	9	-7*	3.34	4.06
6	9	-6	6.42	4.01
6	9	-5*	3.59	4.06
6	9	-4*	3.04	0.03
6	9	-3*	4.53	2.02
6	9	-2*	3.20	2.01
6	9	-1*	5.55	3.54
6	9	0*	2.71	0.38
6	10	-5*	4.59	2.91
6	10	-4*	3.13	0.09
6	10	-3	5.69	2.08
7	-9	2*	3.42	1.34
7	-9	3*	3.06	4.02
7	-9	4*	3.00	3.32
7	-8	-1	7.21	7.54
7	-8	0*	4.06	4.02
7	-8	1*	3.08	2.33
7	-8	2*	2.96	0.91
7	-8	3*	3.46	2.93
7	-8	4	6.27	[illegible]
7	-8	5*	2.08	3.42
7	-8	6	6.98	5.08
7	-7	-2	5.36	1.40
7	-7	-1*	2.98	2.85
7	-7	0*	2.48	4.48
7	-7	1	5.33	7.16
7	-7	2*	2.77	2.58
7	-7	3*	2.79	1.98
7	-7	4	5.83	0.29
7	-7	5*	2.91	3.44
7	-7	6	5.21	3.97
7	-7	7	5.28	2.20
7	-6	-4*	3.18	0.68
7	-6	-3	8.29	8.15
7	-6	-2*	2.96	3.22
7	-6	-1*	2.87	1.05
7	-6	0	4.93	5.64
7	-6	1	6.91	8.94
7	-6	2	6.88	8.90
7	-6	3*	3.45	3.78
7	-6	4*	2.76	3.25
7	-6	5	5.99	6.06
7	-6	6	7.41	7.57
7	-6	7	6.09	4.50
7	-5	-5	5.79	3.47
7	-5	-4	5.38	3.59
7	-5	-3*	4.11	5.41
7	-5	-2	5.52	5.19
7	-5	-1*	3.83	5.12
7	-5	0*	3.24	3.24
7	-5	1*	3.67	3.83
7	-5	2	16.09	17.97
7	-5	3*	4.25	4.35
7	-5	4	5.47	3.05
7	-5	5*	2.75	0.87
7	-5	6*	3.23	0.97
7	-5	7	6.93	6.44
7	-5	8*	3.12	3.23
7	-4	-5	6.57	5.27
7	-4	-4*	3.15	0.28
7	-4	-3*	3.55	6.02
7	-4	-2	9.57	9.44
7	-4	-1	11.14	11.66
7	-4	0	5.57	5.17
7	-4	1*	3.42	1.11
7	-4	2*	3.27	3.80
7	-4	3	13.76	14.76
7	-4	4	12.47	12.99
7	-4	5	5.81	4.43
7	-4	6*	3.84	3.84
7	-4	7*	2.91	2.35
7	4	8*	3.06	2.92
7	-3	-6*	4.74	4.03
7	3	-5*	4.49	5.25
7	-3	-4*	4.40	2.56
7	-3	-3*	2.64	1.37
7	-3	-2	10.66	11.12
7	-3	-1	9.70	9.03
7	-3	0	23.50	23.28
7	-3	1*	2.46	1.21
7	-3	2	6.62	5.39
7	-3	3	8.93	9.35
7	-3	4	4.64	5.31
7	-3	5	10.80	10.51
7	-3	6*	2.78	2.93
7	-3	7*	2.87	1.16
7	-3	8*	3.14	2.21
7	-2	-7*	3.17	1.24
7	-2	-6	5.00	3.22
7	-2	-5	8.59	7.69
7	-2	-4	8.44	7.90
7	-2	-3	7.63	7.09
7	-2	-2	4.34	5.86
7	-2	-1	0.77	0.66
7	-2	0	11.75	11.80
7	-2	1	16.97	17.60
7	-2	2	10.98	12.00
7	-2	3*	2.51	1.80
7	-2	4	10.03	11.16
7	-2	5	6.62	[illegible]
7	-2	6*	4.16	4.49
7	-2	7	5.28	3.20
7	-2	8*	3.28	0.56
7	-1	-7*	3.13	2.13
7	-1	-6*	3.29	2.07
7	-1	-5	8.22	6.46
7	-1	-4	15.19	13.52
7	-1	-3	7.77	7.59
7	-1	-2	16.07	17.06
7	-1	-1	11.76	11.61
7	-1	0	10.65	17.92
7	-1	1	15.92	17.27
7	-1	2	5.32	6.25
7	-1	3	8.25	8.87
7	-1	4*	2.62	7.46
7	-1	5	[illegible]	[illegible]
7	-1	[illegible]	[illegible]	[illegible]
7	-1	[illegible]	[illegible]	[illegible]
7	0	[illegible]	[illegible]	[illegible]
7	0	[illegible]	[illegible]	[illegible]
7	0	[illegible]	[illegible]	[illegible]
7	0	[illegible]	[illegible]	[illegible]
7	0	-4	[illegible]	[illegible]
7	0	-3	11.42	[illegible]
7	0	[illegible]	[illegible]	4.11
7	0	-1	8.71	9.94
7	0	0*	[illegible]	2.21
7	0	1	11.36	11.88
7	0	2	15.48	16.59
7	0	3	10.40	9.74
7	0	4	5.04	1.96
7	0	5*	4.23	1.86
7	0	6*	2.91	3.49
7	0	7*	3.05	2.45
7	1	-8*	3.08	1.95
7	1	-7	6.22	6.13
7	1	-6	[illegible]	8.25
7	1	-5	4.65	1.15
7	1	-4	4.73	6.61
7	1	-3	20.45	18.93
7	1	-2	27.98	21.28
7	1	-1	14.62	15.71
7	1	0*	2.18	1.38
7	1	1*	2.52	0.45
7	1	2	7.87	10.06
7	1	3	12.34	13.04
7	1	4*	3.41	5.73
7	1	5*	2.07	1.53
7	1	6*	3.03	1.64
7	1	7*	3.28	2.35
7	2	-8*	3.10	1.69
7	2	-7*	3.52	3.56
7	2	-6	19.23	14.00
7	2	-5*	[illegible]	4.92
7	2	-4*	3.28	1.08
7	2	-3*	3.73	2.04
7	2	-2	6.55	7.44
7	2	-1	15.61	17.38
7	2	0	11.99	13.11
7	2	1	4.07	4.98
7	2	2*	3.34	4.91
7	2	3*	4.02	3.19
7	2	4	5.57	5.86
7	2	5*	3.08	2.64
7	2	6*	3.19	3.69
7	3	-8*	3.16	1.77
7	3	-7*	3.31	3.79
7	3	-6*	3.34	1.27
7	3	-5	17.09	16.27
7	3	-4	13.33	13.92
7	3	-3*	3.33	5.29
7	3	-2	8.52	9.01
7	3	-1	7.24	8.32
7	3	0	11.86	12.10
7	3	1	13.69	13.01
7	3	2	4.73	2.28
7	3	3*	2.78	[illegible]
7	3	4*	3.74	5.01
7	3	5*	4.37	[illegible]
7	3	6*	3.24	0.63
7	4	-8	10.34	[illegible]
7	4	-7*	4.39	1.71
7	4	-6	5.15	[illegible]
7	4	-5	8.12	[illegible]
7	4	-4	9.51	8.28
7	4	-3	[illegible]	12.45
7	4	-2*	3.21	2.93
7	4	-1*	[illegible]	3.02
7	4	0	10.61	10.45
7	4	1*	[illegible]	4.04
7	4	2*	3.58	[illegible]
7	4	3*	[illegible]	[illegible]
7	4	4*	3.04	2.61
7	4	5*	[illegible]	2.66
7	5	-8*	3.18	1.71
7	5	-7	8.48	8.16
7	5	-6*	2.97	4.12
7	5	-5*	4.68	2.97
7	5	-4	10.67	10.99
7	5	-3	7.62	9.09
7	5	2	8.21	6.62
7	5	1	6.68	6.94
7	5	0*	2.38	3.03
7	5	1	6.15	5.89
7	5	2	7.14	6.80
7	5	3*	3.98	3.09
7	5	4*	3.16	0.13
7	6	-8	5.97	4.77
7	6	-7	6.90	5.44
7	6	-6*	[illegible]	3.11
7	6	-5	5.53	4.48
7	6	-4	6.15	4.33
7	6	-3	8.05	6.35
7	6	-2	9.71	9.88
7	6	1*	3.02	2.58
7	6	0*	2.46	1.12
7	6	1*	2.95	3.27
7	6	2*	3.05	1.06
7	6	3*	3.17	2.93
7	7	8*	5.33	0.68
7	7	-7*	3.43	4.65
7	7	-6*	5.23	6.79
7	7	-5*	3.21	4.91
7	7	-4*	3.08	0.56
7	7	-3*	2.86	1.29
7	7	-2	5.11	4.85
7	7	-1	6.76	5.18
7	7	0	6.73	5.43
7	7	1*	3.09	0.64
7	7	2*	3.26	0.99
7	8	-7*	4.88	0.31
7	8	-6*	3.99	4.77
7	8	-5*	4.42	4.58
7	8	-4*	[illegible]	5.32
7	8	-3*	3.02	0.91
7	8	-2*	3.09	1.98
7	8	-1*	3.66	4.42
7	8	0*	2.84	0.52
7	8	1*	4.71	1.76
7	9	-6*	[illegible]	3.38
7	9	-5*	[illegible]	0.86
7	9	-4*	3.78	3.31
7	9	-3*	3.16	2.03
7	9	-2*	3.32	2.04
8	-8	1*	3.18	3.91
8	-8	2*	3.12	3.36
8	-8	3*	3.05	2.32
8	-8	4*	4.25	3.47
8	-7	-1*	3.18	2.95
8	-7	0*	2.53	2.78
8	-7	1*	3.33	3.36
8	-7	2*	2.98	5.39
8	-7	3*	4.62	4.46
8	-7	4*	3.01	4.87
8	-7	5*	2.95	2.76
8	-7	6*	[illegible]	0.67
8	-6	-3*	3.13	1.26
8	-6	-2*	[illegible]	3.78
8	-6	-1	7.48	7.84
8	-6	0	4.51	5.84
8	-6	1*	2.06	2.41
8	-6	2*	3.59	0.59
8	-6	3*	4.06	3.47
8	-6	4	5.45	7.32
8	-6	5*	3.66	4.43
8	-6	6*	3.38	3.84
8	-5	-4*	3.03	0.66
8	-5	-3*	3.72	1.49
8	-5	-2*	4.82	0.05
8	-5	-1*	4.32	0.69
8	-5	0	9.52	10.13
8	-5	1	6.07	[illegible]
8	-5	2	5.03	[illegible]
8	-5	3*	2.78	0.47
8	-5	4*	2.84	3.22
8	-5	5*	[illegible]	5.73
8	-5	6*	3.71	3.43
8	-5	7*	3.12	3.03
8	-4	-5*	[illegible]	1.14
8	-4	-4	5.72	5.35
8	-4	-3	10.11	8.94
8	-4	-2*	[illegible]	3.00
8	-4	-1*	2.06	1.08
8	-4	0	[illegible]	6.19
8	-4	1	8.84	8.81
8	-4	2	10.69	11.88
8	-4	3*	2.81	3.82
8	-4	4*	2.84	8.77
8	-4	5	5.35	6.50
8	-4	6*	[illegible]	[illegible]
8	-4	7*	2.96	3.22
8	-3	-5*	3.96	1.62
8	-3	-4*	3.05	3.77
8	-3	-3*	[illegible]	3.61
8	-3	-2	[illegible]	11.04
8	-3	-1*	[illegible]	4.77
8	-3	0	[illegible]	2.21
8	-3	1*	3.78	5.68
8	-3	2	6.72	8.93
8	-3	3	7.31	8.38
8	-3	4*	[illegible]	2.78
8	-3	5*	2.76	2.48
8	-3	6*	[illegible]	3.43
8	-3	7*	3.05	2.46
8	-2	-6	5.83	4.28
8	-2	-5	6.91	5.08
8	-2	-4*	2.06	2.28
8	-2	3	7.18	5.44
8	-2	-2	12.27	11.30
8	-2	-1	9.37	9.02
8	-2	0	9.71	10.18
8	-2	1*	2.69	2.06
8	-2	2	5.78	5.44
8	-2	3	12.13	13.98
8	-2	4*	3.21	6.07
8	-2	5*	2.91	3.04
8	-2	6*	3.08	0.15
8	-2	7*	3.42	3.62
8	-1	-7*	3.21	3.46
8	-1	-6	6.77	4.74
8	-1	-5*	3.14	3.74
8	-1	-4*	4.23	5.94
8	-1	-3*	3.31	1.22
8	-1	-2	10.11	10.69
8	-1	-1	10.45	10.84
8	-1	0	10.72	10.42
8	-1	1	6.27	4.62
8	-1	2*	2.61	2.88
8	-1	3*	3.98	2.79
8	-1	4	5.39	7.06
8	-1	5	6.19	3.93
8	-1	6*	3.03	2.08
8	-1	7*	3.21	0.46
8	0	-7*	3.19	1.62
8	0	-6	6.97	5.78
8	0	-5	8.14	6.44
8	0	-4	10.60	9.68
8	0	-3	9.02	4.25
8	0	-2*	4.42	2.24
8	0	-1	10.47	9.67
8	0	0	10.86	9.88
8	0	1	14.08	17.24
8	0	2*	3.04	3.08
8	0	3*	2.72	1.18
8	0	4*	2.89	1.08
8	0	5	6.21	7.84
8	0	6*	3.07	1.55
8	1	-7*	3.19	1.15
8	1	-6*	3.05	0.43
8	1	-5	6.13	5.19
8	1	-4	13.75	12.96
8	1	-3	10.25	9.48
8	1	-2	5.86	5.37
8	1	-1	4.03	4.51
8	1	0	10.46	9.58
8	1	1	8.55	7.63
8	1	2	8.66	7.58
8	1	3*	2.83	1.81
8	1	4*	2.79	0.34
8	1	5*	2.97	1.88
8	1	6*	3.13	3.51
8	2	-8*	5.04	5.14
8	2	-7*	5.10	3.70
8	2	6*	4.49	3.99
8	2	-5*	4.36	2.83
8	2	-4	6.04	1.55
8	2	-3	10.89	11.25
8	2	-2	7.57	7.32
8	2	-1	11.41	11.76
8	2	0*	2.24	2.50
8	2	1*	4.55	6.95
8	2	2	7.36	6.65
8	2	3	8.64	8.24
8	2	4*	3.14	0.85
8	2	5*	3.07	0.70
8	3	-8*	4.36	3.17
8	3	-7*	3.66	4.09
8	3	-6	8.76	8.51
8	3	-5*	3.87	3.21
8	3	-4*	4.44	1.38
8	3	-3	9.64	11.04
8	3	-2	10.62	10.06
8	3	-1	6.11	6.04
8	3	0	4.40	1.44
8	3	1*	2.78	3.27
8	3	2*	2.90	3.64
8	3	3	5.14	3.73
8	3	4	5.52	3.92
8	3	5*	3.11	1.19
8	4	-8*	5.37	0.35
8	4	-7	5.76	5.24
8	4	-6	5.02	5.20
8	4	-5	8.44	6.50
8	4	-4*	2.84	1.12
8	4	-3*	3.87	3.38
8	4	-2	6.57	7.12
8	4	-1	7.82	8.05
8	4	0	5.22	5.06
8	4	1	7.26	5.31
8	4	2*	3.34	1.66
8	4	3*	3.05	1.29
8	4	4	5.11	3.14
8	5	-8*	3.28	3.06
8	5	-7*	3.39	1.26
8	5	-6*	4.26	4.86
8	5	-5	10.84	10.15
8	5	-4	7.66	5.90
8	5	-3	4.79	2.10
8	5	-2*	2.82	1.67
8	5	-1	5.35	6.56
8	5	0	5.59	5.30
8	5	1*	3.03	3.15
8	5	2*	2.96	2.24
8	5	3*	3.06	3.06
8	6	-7*	3.17	1.25
8	6	6*	3.49	2.66
8	6	-5*	2.92	1.57
8	6	-4	5.99	6.21
8	6	-3	5.84	5.80
8	6	-2*	3.87	0.60
8	6	-1*	3.05	0.90
8	6	0*	3.55	3.64
8	6	1*	3.36	1.40
8	6	2*	3.10	3.22
8	7	-7*	3.46	5.49
8	7	-6*	3.18	0.60
8	7	-5*	4.59	1.49
8	7	-4*	5.16	3.39
8	7	-3	6.53	5.24
8	7	-2*	4.18	3.58
8	7	-1*	3.12	0.83
8	7	0*	2.67	0.13
8	7	1*	3.24	3.95
8	8	-6*	3.36	2.72
8	8	-5*	3.28	1.86



H	K	L	FOBS	FCLC
0	0	2	4.72	5.43
0	0	4	5.06	5.63
0	0	6	1.02	1.65
0	0	8	4.31	4.17
0	0	10	3.16	2.73
0	1	1	9.21	8.95
0	1	2	20.50	20.99
0	1	3	2.66	2.64
0	1	4	0.12	0.43
0	1	5	1.90	2.10
0	1	6	0.90	0.90
0	1	7	1.97	2.12
0	1	8	3.15	3.07
0	1	9*	0.69	0.25
0	1	10	1.00	1.03
0	1	11*	0.60	0.63
0	2	0	6.45	5.80
0	2	1	24.20	22.49
0	2	2	31.74	30.36
0	2	3	3.22	2.96
0	2	4	3.94	3.58
0	2	5	1.46	1.31
0	2	6	3.84	4.00
0	2	7	2.21	2.24
0	2	8	1.00	1.79
0	2	9	3.05	2.99
0	2	10*	0.64	0.10
0	3	1	15.04	13.60
0	3	2	5.14	4.77
0	3	3	4.57	4.26
0	3	4	5.00	5.87
0	3	5	1.05	1.94
0	3	6	5.51	5.66
0	3	7	2.72	2.86
0	3	8	1.40	1.10
0	3	9*	0.62	0.58
0	3	10*	0.77	0.39
0	4	0	9.56	9.61
0	4	1	2.80	2.77
0	4	2	4.06	4.60
0	4	3	11.11	10.82
0	4	4	11.50	11.36
0	4	5	4.10	4.09
0	4	6	2.33	2.36
0	4	7	2.34	2.29
0	4	8*	0.97	1.39
0	4	9	1.11	0.20
0	4	10*	1.01	0.52
0	5	1	5.00	4.82
0	5	2	4.65	4.16
0	5	3	2.53	2.56
0	5	4	5.60	5.37
0	5	5	1.13	0.94
0	5	6	5.93	5.68
0	5	7*	0.84	0.25
0	5	8*	0.64	0.71
0	5	9*	0.90	0.12
0	6	0*	0.07	0.57
0	6	1	2.92	3.10
0	6	2	4.09	4.03
0	6	3	4.31	4.02
0	6	4	5.16	5.16
0	6	5	7.00	6.94
0	6	6*	0.07	0.20
0	6	7*	0.61	0.46
0	6	8	2.06	2.00
0	6	9*	0.05	0.74
0	7	1*	0.54	0.10
0	7	2*	0.90	0.30
0	7	3	5.40	5.40
0	7	4	1.90	1.94
0	7	5	2.29	2.03

H	K	L	FOBS	FCLC
0	7	6	2.29	2.40
0	7	7*	0.70	1.57
0	7	8*	0.07	0.00
0	8	0	2.36	2.31
0	8	1	4.66	4.73
0	8	2	3.14	3.13
0	8	3	1.93	1.86
0	8	4	1.39	1.16
0	8	5	1.00	1.97
0	8	6	1.52	1.32
0	8	7	2.09	3.02
0	8	8*	0.00	0.46
0	9	1*	0.97	0.90
0	9	2	3.10	3.25
0	9	3	2.35	2.52
0	9	4*	0.98	0.43
0	9	5	1.49	1.65
0	9	6*	0.65	0.52
0	9	7*	0.79	0.83
0	10	0	4.89	5.24
0	10	1	1.91	1.50
0	10	2	1.21	0.93
0	10	3*	0.63	0.09
0	10	4*	0.65	0.35
0	10	5	1.14	1.51
0	11	1	1.91	2.14
0	11	2	1.45	1.70
0	11	3*	0.66	0.06
1	0	-10	1.09	1.65
1	0	-8*	0.69	0.07
1	0	-6*	0.70	0.65
1	0	-4	1.02	1.70
1	0	0	5.60	5.96
1	0	2	12.91	12.66
1	0	4	4.46	4.20
1	0	6	6.77	6.05
1	0	8	3.39	3.25
1	0	10*	0.70	1.22
1	1	-11*	0.82	0.59
1	1	-10	1.46	1.95
1	1	-9	2.21	2.27
1	1	-8*	0.06	0.04
1	1	-7	1.50	1.97
1	1	-6	2.97	3.16
1	1	-5*	0.83	0.05
1	1	-4	9.75	10.22
1	1	-3	2.43	2.54
1	1	-2	8.99	10.46
1	1	-1	18.59	20.29
1	1	1	11.12	11.35
1	1	2	12.05	12.05
1	1	3	1.30	1.26
1	1	4	2.47	2.72
1	1	5*	0.61	0.31
1	1	6	3.74	3.99
1	1	7	2.60	2.61
1	1	8	4.11	3.80
1	1	9	1.59	1.71
1	1	10*	0.70	0.15
1	2	-11*	0.81	1.50
1	2	-10*	0.77	0.00
1	2	-9*	0.81	0.41
1	2	-8	1.79	1.03
1	2	-7	1.79	1.72
1	2	-6	2.09	1.95
1	2	-5*	0.59	0.43
1	2	-4	10.50	10.13
1	2	-3	14.63	14.90
1	2	-2	9.35	9.07
1	2	-1	13.49	13.81
1	2	0	32.03	30.86
1	2	1	5.97	6.04

H	K	L	FOBS	FCLC
1	2	2	3.03	3.75
1	2	3*	0.53	0.53
1	2	4	6.82	7.21
1	2	5	3.87	4.21
1	2	6	2.07	2.03
1	2	7	3.00	3.99
1	2	8*	0.71	0.47
1	2	9	1.32	0.54
1	2	10	2.30	1.90
1	3	-10*	0.76	0.19
1	3	-9	1.55	1.21
1	3	-8	3.65	3.39
1	3	-7*	0.75	0.69
1	3	-6	2.75	2.43
1	3	-5	5.30	5.27
1	3	-4	6.10	6.30
1	3	-3	9.02	8.39
1	3	-2	3.94	4.02
1	3	-1	10.06	8.93
1	3	0	3.31	3.31
1	3	1	4.35	4.03
1	3	2	8.42	9.02
1	3	3	7.39	7.40
1	3	4	6.09	6.49
1	3	5	4.73	5.01
1	3	6	3.99	1.10
1	3	7*	0.69	0.03
1	3	8*	0.73	0.00
1	3	9*	0.92	0.96
1	3	10*	0.79	0.93
1	4	-10*	0.70	0.71
1	4	-9*	0.76	1.16
1	4	-8	2.20	2.29
1	4	-7	2.42	2.40
1	4	-6	5.40	5.24
1	4	-5	5.50	5.20
1	4	-4	5.26	4.05
1	4	-3*	0.56	0.29
1	4	-2	5.01	4.79
1	4	-1	4.14	3.81
1	4	0	4.14	3.90
1	4	1	12.03	11.66
1	4	2	15.90	15.72
1	4	3	3.34	3.49
1	4	4	1.13	0.01
1	4	5	2.14	2.40
1	4	6	1.33	1.92
1	4	7*	0.70	0.12
1	4	8*	1.03	1.29
1	4	9	2.09	2.10
1	5	-10*	0.79	0.23
1	5	-9*	0.76	0.01
1	5	-8	1.99	2.00
1	5	-7*	0.70	0.06
1	5	-6	6.43	5.92
1	5	-5	1.79	1.50
1	5	-4	4.65	4.44
1	5	-3	2.61	2.64
1	5	-2	2.50	2.49
1	5	-1	5.17	5.36
1	5	0	1.56	1.19
1	5	1	2.04	1.81
1	5	2*	0.61	0.45
1	5	3	2.79	2.07
1	5	4	9.04	10.06
1	5	5*	0.60	0.56
1	5	6*	0.90	1.14
1	5	7*	0.73	0.44
1	5	8*	0.76	0.27
1	5	9*	0.70	0.39
1	6	-9*	1.00	0.40
1	6	-8*	0.96	0.00

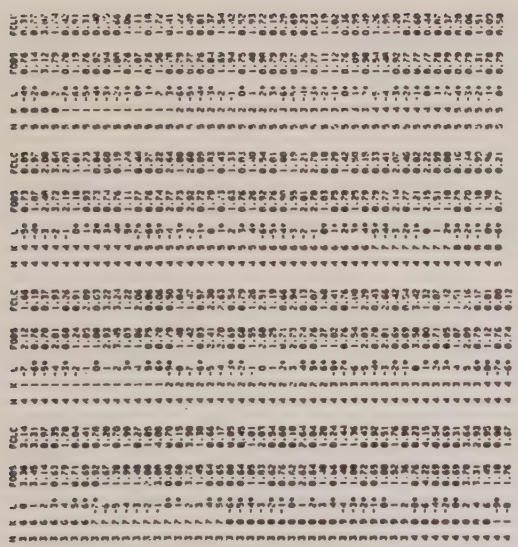
H	K	L	FOBS	FCLC
1	6	-7	4.16	4.01
1	6	-6	2.46	2.61
1	6	-5	1.63	1.40
1	6	-4	4.19	3.90
1	6	-3	1.60	1.76
1	6	-2*	0.63	0.74
1	6	-1	2.31	2.30
1	6	0	3.19	3.25
1	6	1	4.37	4.77
1	6	2	6.44	6.59
1	6	3	7.14	7.22
1	6	4	1.60	1.55
1	6	5*	0.69	0.46
1	6	6	2.44	2.51
1	6	7	1.49	1.38
1	6	8	1.29	0.80
1	7	-8	1.93	2.05
1	7	-7*	0.75	0.16
1	7	-6*	0.96	0.43
1	7	-5	4.44	4.49
1	7	-4	2.40	2.11
1	7	-3*	1.00	0.37
1	7	-2	1.69	1.09
1	7	-1*	0.65	0.37
1	7	0	2.23	2.43
1	7	1	4.41	4.67
1	7	2	3.43	3.54
1	7	3	4.25	4.34
1	7	4	1.31	1.63
1	7	5*	1.19	1.61
1	7	6	2.27	2.67
1	7	7*	0.84	1.32
1	7	8*	1.09	0.46
1	8	-8*	0.70	0.62
1	8	-7*	1.10	1.51
1	8	-6*	0.75	0.64
1	8	-5	1.76	1.90
1	8	-4	1.49	1.40
1	8	-3	4.02	3.90
1	8	-2	2.15	1.90
1	8	-1	3.61	3.46
1	8	0	3.50	3.56
1	8	1*	0.69	0.32
1	8	2*	0.91	0.89
1	8	3*	1.00	1.30
1	8	4*	0.87	1.62
1	8	5	4.35	4.52
1	8	6*	0.76	0.38
1	8	7*	0.79	1.00
1	9	-7*	0.70	1.08
1	9	-6*	0.76	0.29
1	9	-5*	1.21	1.20
1	9	-4	1.90	1.74
1	9	-3	1.77	1.80
1	9	-2	2.40	2.03
1	9	-1*	0.71	0.30
1	9	0	3.69	3.85
1	9	1	3.31	3.32
1	9	2*	0.72	0.34
1	9	3	1.70	1.73
1	9	4*	0.00	0.07
1	9	5*	0.76	0.14
1	9	6*	0.79	0.33
1	10	-5*	0.77	0.02
1	10	-4	1.33	1.30
1	10	-3	1.56	1.30
1	10	-2	3.49	4.17
1	10	-1*	1.03	0.95
1	10	0*	0.83	0.29
1	10	1*	0.74	0.06
1	10	2*	0.75	0.37
1	10	3	1.55	1.47

H	K	L	FOBS	FCLC
1	10	4	1.44	1.15
1	11	-3*	0.79	0.66
1	11	-2*	1.07	0.40
1	11	-1	2.72	3.04
1	11	0*	0.97	1.40
1	11	1*	0.70	0.27
1	11	2	1.38	1.15
2	0	-10*	0.76	0.80
2	0	-8*	0.70	0.55
2	0	-6	1.00	1.05
2	0	-4	11.60	13.17
2	0	-2	11.59	11.80
2	0	0	5.16	5.20
2	0	2	1.82	1.84
2	0	4	6.50	6.82
2	0	6	1.87	1.63
2	0	8	2.22	2.23
2	1	-10*	0.76	0.11
2	1	-9*	0.96	1.11
2	1	-8*	0.70	0.54
2	1	-7*	0.67	0.75
2	1	-6	3.31	3.83
2	1	-5	3.10	3.50
2	1	-4	6.53	7.67
2	1	-3	9.83	10.49
2	1	-2	7.41	8.53
2	1	-1	6.25	6.13
2	1	0	8.06	8.24
2	1	1	3.06	2.83
2	1	2	3.29	3.32
2	1	3	4.00	4.01
2	1	4	2.86	2.56
2	1	5	5.37	5.59
2	1	6	5.69	5.64
2	1	7	2.83	2.87
2	1	8*	0.74	0.90
2	1	9*	0.77	0.29
2	2	-10*	0.76	0.44
2	2	-9	1.29	1.40
2	2	-8*	0.70	0.66
2	2	-7*	0.82	0.20
2	2	-6	2.13	2.19
2	2	-5	5.58	5.89
2	2	-4	4.76	5.05
2	2	-3	1.92	2.00
2	2	-2	11.63	12.51
2	2	-1	6.27	6.49
2	2	0	3.00	3.30
2	2	1*	0.54	0.33
2	2	2	4.56	4.89
2	2	3	4.35	4.46
2	2	4*	0.87	0.25
2	2	5	2.93	3.07
2	2	6*	0.60	0.40
2	2	7	1.00	1.73
2	2	8	2.02	2.22
2	2	9*	0.97	0.34
2	3	-10	1.69	1.45
2	3	-9	1.20	1.26
2	3	-8	1.23	0.83
2	3	-7	3.03	3.94
2	3	-6	3.73	3.69
2	3	-5	2.74	3.10
2	3	-4	2.89	2.93
2	3	-3	4.70	4.94
2	3	-2	5.71	5.61
2	3	-1	5.23	5.39
2	3	0	7.13	7.24
2	3	1	8.80	9.05
2	3	2	4.30	4.15
2	3	3	5.70	5.91
2	3	4	6.30	6.75

H	K	L	FOBS	FCLC
2	3	5*	0.67	0.77
2	3	6*	0.70	0.37
2	3	7*	1.04	0.03
2	3	8	1.50	1.72
2	3	9	1.77	1.96
2	4	-10*	1.13	1.20
2	4	-9*	0.76	0.82
2	4	-8	1.39	1.63
2	4	-7*	0.71	1.09
2	4	-6	3.00	2.93
2	4	-5	1.73	2.05
2	4	-4	1.77	1.60
2	4	-3	2.01	1.86
2	4	-2	2.34	2.23
2	4	-1	6.35	6.32
2	4	0	10.32	10.24
2	4	1*	0.60	0.46
2	4	2	2.92	3.09
2	4	3*	0.65	0.46
2	4	4	1.64	2.06
2	4	5*	0.68	0.09
2	4	6	2.01	1.77
2	4	7	2.50	2.55
2	4	8*	0.76	0.65
2	5	-9*	0.77	0.34
2	5	-8	3.90	3.89
2	5	-7*	0.72	0.85
2	5	-6	2.92	2.66
2	5	-5*	0.69	0.81
2	5	-4	1.04	1.74
2	5	-3	2.60	2.75
2	5	-2*	0.85	0.73
2	5	-1	1.05	1.58
2	5	0	4.64	4.44
2	5	1	3.20	3.42
2	5	2	10.30	10.94
2	5	3*	0.73	0.84
2	5	4	1.46	1.46
2	5	5	1.41	0.86
2	5	6*	1.03	0.94
2	5	7*	0.75	0.47
2	5	8*	1.22	0.70
2	6	-9	1.47	1.47
2	6	-8*	0.76	0.84
2	6	-7*	0.73	0.41
2	6	-6	2.02	2.65
2	6	-5*	0.60	0.17
2	6	-4*	0.67	0.06
2	6	-3*	1.06	0.61
2	6	-2	1.45	0.85
2	6	-1	3.33	3.11
2	6	0	5.70	5.70
2	6	1	3.79	3.89
2	6	2	2.85	2.94
2	6	3	2.07	2.26
2	6	4	2.02	2.09
2	6	5*	1.15	1.24
2	6	6	1.39	1.51
2	6	7*	0.96	0.67
2	7	-8*	0.70	0.04
2	7	-7	2.81	2.50
2	7	-6	2.43	1.09
2	7	-5*	0.71	0.57
2	7	-4	2.12	2.09
2	7	-3*	1.04	0.57
2	7	-2	3.33	3.23
2	7	-1	1.92	2.07
2	7	0	3.60	3.47
2	7	1	5.19	5.24
2	7	2*	0.69	0.07
2	7	3*	0.70	0.03
2	7	4	4.06	4.10

H	K	L	FOBS	FCLC
2	7	5*	1.24	1.50
2	7	6	1.20	0.81
2	7	7*	0.96	0.32
2	8	-7*	1.10	1.12
2	8	-6*	1.06	0.04
2	8	-5	1.04	1.99
2	8	-4	1.52	1.51
2	8	-3	1.39	1.10
2	8	-2	2.50	2.41
2	8	-1	1.05	1.94
2	8	0*	0.80	0.13
2	8	1*	1.00	1.03
2	8	2*	0.87	1.14
2	8	3	3.90	4.31
2	8	4*	0.74	0.20
2	8	5*	0.77	0.07
2	8	6*	0.79	0.20
2	9	-6*	0.70	0.54
2	9	-5	1.96	1.66
2	9	-4	2.94	2.50
2	9	-3*	0.06	1.08
2	9	-2	2.82	2.37
2	9	-1	2.86	2.80
2	9	0	1.21	0.29
2	9	1*	1.21	1.36
2	9	2*	0.74	0.47
2	9	3*	0.76	1.34
2	9	4*	1.01	0.49
2	9	5	1.59	1.60
2	10	-4	1.66	1.99
2	10	-3*	0.77	0.22
2	10	-2*	1.24	1.46
2	10	-1*	0.76	0.07
2	10	0*	0.72	0.50
2	10	1*	1.10	0.80
2	10	2*	1.29	1.16
2	10	3*	0.70	0.91
3	0	-10*	0.77	0.53
3	0	-8*	0.72	0.06
3	0	-6	2.10	2.44
3	0	-4	7.30	7.50
3	0	-2*	0.67	0.98
3	0	0*	0.61	0.37
3	0	2	2.93	3.17
3	0	4	1.99	1.82
3	0	6	3.30	3.10
3	0	8	1.74	1.34
3	1	-10*	0.70	0.21
3	1	-9*	0.75	0.20
3	1	-8	1.45	1.14
3	1	-7	2.40	2.36
3	1	-6	3.85	3.96
3	1	-5	4.72	5.10
3	1	-4	2.31	2.26
3	1	-3	2.41	2.51
3	1	-2	4.00	3.91
3	1	-1	1.24	1.01
3	1	0	2.14	2.12
3	1	1	3.36	3.41
3	1	2*	0.73	0.54
3	1	3	5.56	5.58
3	1	4	5.60	5.39
3	1	5	2.50	2.01
3	1	6	1.40	1.71
3	1	7*	1.13	0.45
3	1	8*	0.70	0.20
3	2	-10*	0.79	0.00
3	2	-9*	0.76	0.33
3	2	-8*	0.73	0.36
3	2	-7	1.90	2.00
3	2	-6	2.33	2.46
3	2	-5	1.70	1.36

H	K	L	FOBS	FCLC
3	2	-4	3.63	3.67
3	2	-3	4.50	4.32
3	2	-2	3.62	3.71
3	2	-1*	0.67	0.56
3	2	0*	0.80	1.06
3	2	1	2.97	2.80
3	2	2	2.45	2.20
3	2	3*	1.09	0.60
3	2	4*	0.68	0.33
3	2	5	2.90	2.87
3	2	6*	1.19	1.23
3	2	7*	0.75	0.24
3	2	8*	0.79	1.10
3	3	-9	2.03	1.82
3	3	-8	1.40	1.55
3	3	-7*	0.01	0.73
3	3	-6	1.31	1.34
3	3	-5	1.21	1.71
3	3	-4	3.03	3.10
3	3	-3	3.60	4.17
3	3	-2	2.09	2.96
3	3	-1	5.45	5.57
3	3	0	1.67	1.30
3	3	1	2.87	3.01
3	3	2	5.90	6.17
3	3	3*	0.67	1.12
3	3	4*	0.70	0.40
3	3	5	1.40	1.11
3	3	6	1.59	2.12
3	3	7	2.70	2.60
3	4	-9*	0.70	0.34
3	4	-8	1.60	1.76
3	4	-7	1.74	1.84
3	4	-6*	0.70	0.20
3	4	-5*	0.60	0.35
3	4	-4*	0.67	0.30
3	4	-3	1.74	1.60
3	4	-2	4.59	4.40
3	4	-1	1.80	1.82
3	4	0	5.06	4.64
3	4	1	1.07	1.65
3	4	2	1.91	1.03
3	4	3	1.40	1.30
3	4	4	1.15	1.40
3	4	5	1.77	1.81
3	4	6*	0.70	0.26
3	4	7*	0.68	0.37
3	5	-9*	0.69	0.32
3	5	-8*	0.80	0.09
3	5	-7*	0.65	0.04
3	5	-6*	0.95	0.76
3	5	-5	1.60	1.35
3	5	-4*	0.85	0.64
3	5	-3*	0.59	0.60
3	5	-2	4.99	4.68
3	5	-1	2.21	2.15
3	5	0	7.61	7.17
3	5	1*	0.60	0.35
3	5	2	1.76	1.69
3	5	3*	0.63	0.81
3	5	4	1.84	1.68
3	5	5*	0.99	0.30
3	5	6	1.40	1.40
3	5	7*	0.71	0.07
3	6	-8	1.53	1.35
3	6	-7*	0.70	0.82
3	6	-6*	0.92	0.01
3	6	-5*	0.63	0.33
3	6	-4*	0.62	0.29
3	6	-3	1.13	1.00
3	6	-2	3.20	2.96
3	6	-1*	0.71	0.23



H	K	L	FOBS	FCLC
0	0	2	8.49	7.10
0	0	4	241.81	253.32
0	0	6	13.29	13.41
0	0	8	76.76	69.74
0	0	10	8.42	8.31
0	0	12	28.05	27.40
0	0	14	3.80	4.11
0	0	16	9.98	10.57
0	0	18	2.35	1.98
0	2	0*	0.72	0.20
0	2	1*	1.27	0.07
0	2	2	5.83	5.73
0	2	3	12.53	13.05
0	2	4*	1.09	0.40
0	2	5	16.96	15.96
0	2	6	8.95	9.42
0	2	7	5.59	5.83
0	2	8	4.05	4.46
0	2	9	10.42	10.19
0	2	10	4.08	4.12
0	2	11	3.89	3.63
0	2	12	5.26	4.97
0	2	13	5.23	5.51
0	2	14*	1.14	0.67
0	2	15*	1.93	1.73
0	2	16	3.10	3.00
0	2	17	2.68	2.66
0	2	18*	2.11	0.14
0	4	0	45.15	47.14
0	4	1	67.79	73.02
0	4	2	17.91	15.30
0	4	3	64.52	60.75
0	4	4	30.00	28.04
0	4	5	43.48	40.15
0	4	6	19.55	20.00
0	4	7	31.45	28.58
0	4	8	12.96	11.90
0	4	9	20.53	19.72
0	4	10	12.01	11.07
0	4	11	13.96	13.44
0	4	12	5.59	5.83
0	4	13	8.79	9.49
0	4	14	[illegible]	6.06
0	4	15	5.44	5.68
0	4	16	2.54	2.83
0	4	17	3.33	4.41
0	4	18	2.71	2.40
0	6	0	3.31	1.76
0	6	1	7.77	7.25
0	6	2	12.40	10.34
0	6	3	5.67	5.96
0	6	4	6.16	5.15
0	6	5	5.73	6.02
0	6	6	18.06	17.33
0	6	7	1.79	1.83
0	6	8	1.66	2.75
0	6	9	3.94	4.94
0	6	10	12.75	12.71
0	6	11*	1.63	0.30
0	6	12*	1.08	0.41
0	6	13	2.49	2.96
0	6	14	6.54	6.69
0	6	15*	1.10	0.13
0	6	16*	1.51	0.33
0	6	17*	1.61	1.39
0	6	18	2.36	2.51
0	8	0	17.07	17.75
0	8	1	11.09	11.61
0	8	2	4.03	4.97
0	8	3	9.10	9.00
0	8	4	10.12	10.93
0	8	5	1.66	2.90

H	K	L	FOBS	FCLC
0	8	6	7.37	6.85
0	8	7	3.72	3.89
0	8	8*	1.51	2.34
0	8	9	3.36	2.97
0	8	10	4.45	4.26
0	8	11	1.83	1.47
0	8	12*	1.13	1.40
0	8	13	3.96	4.17
0	8	14	2.01	1.86
0	10	0*	0.96	0.34
0	10	1	3.10	3.51
0	10	2*	0.98	0.25
0	10	3*	1.31	2.62
0	10	4*	1.14	0.41
0	10	5*	1.04	5.84
0	10	6*	1.00	0.60
0	10	7*	1.11	2.65
0	10	8	2.73	2.33
0	10	9	4.67	5.49
0	10	10*	1.20	1.04
0	10	11*	1.23	1.37
0	10	12	2.19	3.10
0	10	13*	1.39	3.90
0	12	0	9.81	10.69
0	12	1*	1.06	2.63
0	12	2*	1.72	0.66
0	12	3	3.11	3.30
0	12	4	6.69	6.31
0	12	5*	1.12	1.32
0	12	6*	1.14	1.04
0	12	7*	1.07	2.95
0	12	8*	1.19	0.49
0	12	9*	1.21	0.30
0	12	10*	1.24	0.22
0	12	11*	1.27	1.31
0	12	12*	1.30	2.42
0	14	0*	1.14	2.53
0	14	1*	1.15	4.52
0	14	2*	1.14	1.40
0	14	3*	1.17	5.46
0	14	4*	1.34	3.12
0	14	5*	1.18	1.93
0	14	6*	1.21	3.54
0	14	7*	1.23	5.21
0	14	8*	1.25	3.00
0	14	9*	1.26	0.33
0	14	10*	1.29	3.27
0	16	0*	1.22	0.40
0	16	1	10.27	10.90
0	16	2*	1.22	1.58
0	16	3	9.23	9.22
0	16	4*	1.60	0.51
0	16	5	9.36	10.43
0	16	6*	1.20	3.30
0	16	7*	1.32	6.53
0	16	8*	1.32	0.46
0	18	0*	1.34	5.73
0	18	1*	1.20	0.51
0	18	2*	1.20	0.92
0	18	3*	1.38	1.55
0	18	4*	1.34	5.29
0	18	5*	1.32	0.46
1	0	4	23.30	23.09
1	0	6*	0.95	0.73
1	0	8	11.04	14.45
1	0	10*	1.10	0.32
1	0	12	7.56	7.50
1	0	14	2.05	0.83
1	0	16	3.40	3.33
1	0	18*	1.20	0.72
1	1	1	36.84	37.60
1	1	2	23.93	23.80

H	K	L	FOBS	FCLC
1	1	3	37.23	37.92
1	1	4	12.81	11.84
1	1	5	23.10	24.15
1	1	6	11.40	14.00
1	1	7	20.70	22.90
1	1	8	7.65	7.74
1	1	9	10.11	9.67
1	1	10	5.50	4.50
1	1	11	10.91	11.19
1	1	12	4.42	4.49
1	1	13	3.60	3.56
1	1	14*	1.14	1.42
1	1	15	5.82	5.57
1	1	16	2.27	1.96
1	1	17*	1.26	1.42
1	1	18*	1.74	0.60
1	2	1	27.34	28.27
1	2	2	51.43	54.57
1	2	3	11.36	11.20
1	2	4	11.65	11.34
1	2	5	17.81	17.59
1	2	6	24.08	24.56
1	2	8	7.42	7.56
1	2	9	9.19	8.37
1	2	10	14.84	13.42
1	2	11*	1.54	1.52
1	2	12	3.57	3.23
1	2	13	4.54	4.35
1	2	14	6.91	7.00
1	2	15*	1.10	1.10
1	2	16*	1.48	0.65
1	2	17*	1.93	1.72
1	2	18	3.75	3.83
1	3	1	4.83	4.51
1	3	2	99.01	101.60
1	3	3	7.26	6.73
1	3	4	14.85	15.23
1	3	5	3.51	3.26
1	3	6	49.94	49.54
1	3	7	4.23	3.74
1	3	8	12.56	12.51
1	3	9	2.44	2.05
1	3	10	20.12	20.55
1	3	11	2.64	2.30
1	3	12	6.80	7.30
1	3	13*	1.54	0.66
1	3	14	7.82	8.46
1	3	15*	1.19	1.31
1	3	16	2.93	3.51
1	3	17*	1.25	0.29
1	3	18	2.97	3.35
1	4	1	32.09	31.50
1	4	2	90.82	90.97
1	4	3	21.09	20.80
1	4	4	2.56	2.40
1	4	5	16.15	15.99
1	4	6	38.43	38.39
1	4	7	5.75	6.21
1	4	8	1.95	1.78
1	4	9	6.59	6.46
1	4	10	14.18	13.72
1	4	11*	1.40	0.07
1	4	12*	1.07	0.61
1	4	13	3.58	2.93
1	4	14	4.97	4.54
1	4	15*	1.10	0.40
1	4	16*	1.22	0.06
1	4	17*	1.60	0.93
1	4	18*	1.29	1.09
1	5	1	8.58	7.62
1	5	2	11.39	10.85
1	5	3	4.63	4.24

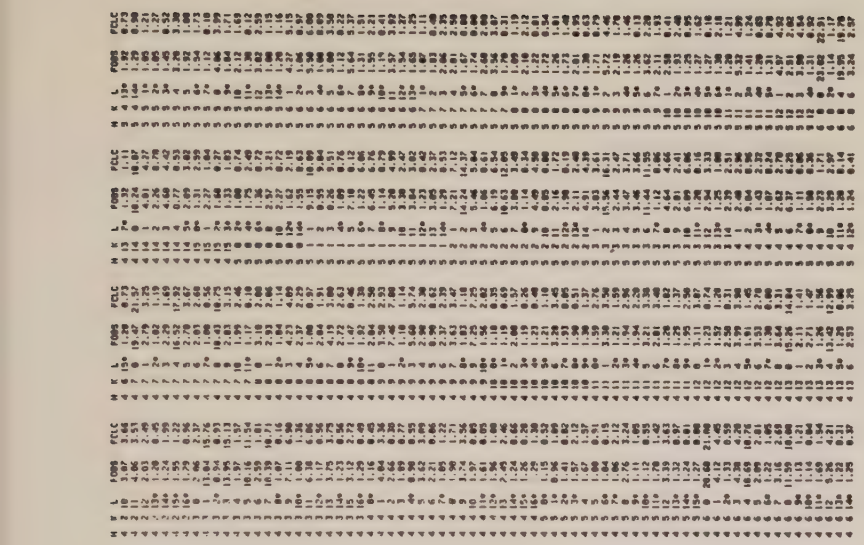
H	K	L	FOBS	FCLC
1	5	4	5.90	5.53
1	5	5*	0.81	0.60
1	5	6*	1.15	0.25
1	5	7	1.55	0.49
1	5	8	4.90	4.84
1	5	9	1.88	1.78
1	5	10	3.27	3.72
1	5	11*	1.56	1.06
1	5	12	2.40	1.98
1	5	13*	1.11	1.12
1	5	14	3.09	3.04
1	5	15*	1.09	1.21
1	5	16*	1.22	0.30
1	5	17*	1.24	0.71
1	5	18*	1.29	1.07
1	6	1	9.99	10.35
1	6	2	4.10	4.42
1	6	3	14.04	13.90
1	6	4	2.93	3.13
1	6	6*	0.86	0.02
1	6	7	11.00	10.09
1	6	8	2.20	2.00
1	6	9	3.08	0.98
1	6	10	3.16	2.66
1	6	11	5.87	5.83
1	6	12	1.95	2.76
1	6	13*	1.63	0.66
1	6	14	3.51	2.60
1	6	15	2.99	3.24
1	6	16	2.54	1.71
1	6	17*	1.29	0.40
1	6	18*	1.29	1.50
1	7	1	30.40	29.46
1	7	2	12.69	13.68
1	7	3	28.41	26.99
1	7	4	3.86	4.17
1	7	5	18.95	18.02
1	7	6	5.12	4.95
1	7	7	16.53	16.25
1	7	8	4.85	4.60
1	7	9	9.34	9.60
1	7	10*	1.04	1.36
1	7	11	9.04	9.43
1	7	12	2.29	2.51
1	7	13	4.26	4.77
1	7	14*	1.50	0.18
1	8	1	12.70	12.66
1	8	2	18.81	19.30
1	8	3	7.74	7.27
1	8	4	4.92	3.85
1	8	5	12.82	11.31
1	8	6	10.78	9.50
1	8	7	2.05	2.19
1	8	8	2.77	3.66
1	8	9	7.10	6.82
1	8	10	4.90	4.35
1	8	11*	1.75	0.35
1	8	12	2.86	2.01
1	8	13	3.29	2.96
1	8	14*	1.58	1.47
1	9	1	4.59	4.86
1	9	2	6.49	6.18
1	9	3	3.49	3.72
1	9	4	4.41	4.50
1	9	5	2.00	2.09
1	9	6	2.03	1.47
1	9	7*	1.43	2.19
1	9	8	4.73	5.07
1	9	9*	1.03	0.91
1	9	10*	1.19	1.93
1	9	11*	1.22	0.83
1	9	12*	2.10	2.86

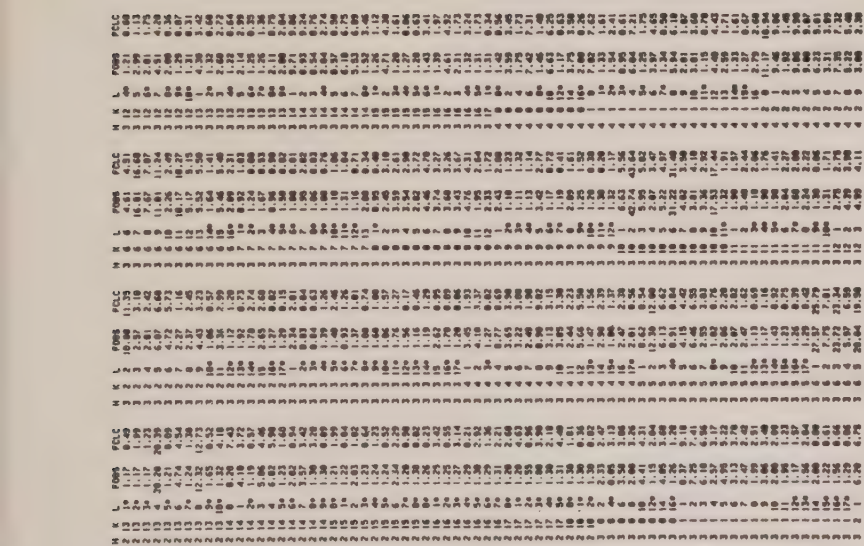
H	K	L	FOBS	FCLC
1	9	13*	1.29	0.18
1	10	1	3.99	4.86
1	10	2	1.91	0.92
1	10	3	2.13	0.94
1	10	4	5.60	5.40
1	10	5	3.72	3.80
1	10	6*	1.09	1.47
1	10	7*	1.12	0.68
1	10	8	7.10	7.39
1	10	9*	1.93	2.40
1	10	10*	1.20	0.97
1	10	11*	1.25	0.91
1	10	12	6.80	5.41
1	10	13*	2.00	1.85
1	11	1	4.10	4.53
1	11	2	3.71	3.65
1	11	3	3.26	1.60
1	11	4	3.56	3.30
1	11	5	3.30	3.30
1	11	6	3.76	4.17
1	11	7*	1.15	2.70
1	11	8*	1.18	3.57
1	11	9*	1.60	2.59
1	11	10*	1.07	4.47
1	11	11*	1.24	2.51
1	11	12*	1.29	2.05
1	12	1	10.55	10.65
1	12	2	6.17	6.02
1	12	3	9.01	10.00
1	12	4*	1.12	3.00
1	12	5	8.41	8.40
1	12	6	4.89	4.00
1	12	7	6.32	6.23
1	12	8	4.32	4.46
1	12	9	5.51	5.10
1	12	10*	1.41	3.15
1	12	11*	1.29	2.00
1	12	12*	1.41	3.21
1	13	1	6.64	6.00
1	13	2*	1.39	1.44
1	13	3	6.50	5.91
1	13	4	2.57	1.70
1	13	5	4.77	4.56
1	13	6*	1.10	1.50
1	13	7*	1.61	4.11
1	13	8*	1.49	1.70
1	13	9*	1.25	2.00
1	13	10*	1.60	1.66
1	13	11*	1.31	2.45
1	14	1*	1.15	1.69
1	14	2*	1.15	0.25
1	14	3*	1.17	3.77
1	14	4*	1.59	0.54
1	14	5*	1.39	0.25
1	14	6	2.26	0.40
1	14	7*	1.24	4.03
1	14	8*	1.24	0.62
1	14	9*	1.27	0.17
1	14	10*	1.30	0.00
1	15	1*	1.10	0.77
1	15	2*	1.21	4.69
1	15	3*	1.43	0.34
1	15	4	2.24	1.17
1	15	5*	1.22	1.07
1	15	6*	1.26	4.92
1	15	7*	1.26	0.23
1	15	8*	1.29	1.06
1	15	9*	1.30	1.11
1	16	1*	1.23	0.10
1	16	2	14.41	15.13
1	16	3	2.09	0.16
1	16	4*	1.26	0.16

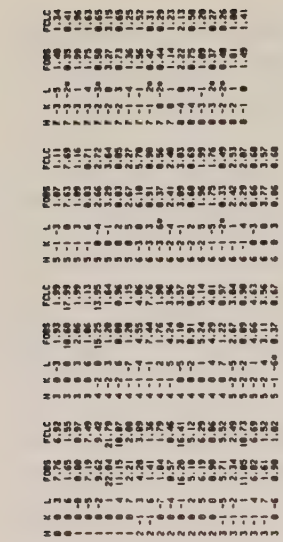
H	K	L	FOBS	FCLC
1	16	5*	1.20	0.84
1	16	6	9.57	10.96
1	16	7*	1.29	0.35
1	16	8*	1.31	0.11
1	17	1*	1.20	2.11
1	17	2	0.23	0.71
1	17	3*	1.20	2.36
1	17	4*	1.20	1.71
1	17	5*	1.30	1.23
1	17	6*	1.36	6.00
1	18	1*	1.31	3.91
1	18	2*	1.30	1.13
1	18	3*	1.32	3.06
1	18	4*	1.31	0.05
2	0	0	12.06	12.61
2	0	2	0.97	0.54
2	0	4	2.12	3.50
2	0	6	13.95	13.72
2	0	8	4.19	2.90
2	0	10	10.07	9.90
2	0	12	2.64	3.07
2	0	14	5.02	5.59
2	0	16*	1.24	2.24
2	0	18	2.21	2.40
2	1	0	26.94	27.96
2	1	1	6.95	7.23
2	1	2	3.03	3.70
2	1	4	13.39	12.52
2	1	5	4.09	3.79
2	1	6	7.30	7.44
2	1	7*	0.00	0.37
2	1	8*	1.42	0.04
2	1	9	1.79	1.29
2	1	10	4.03	4.33
2	1	11	1.00	0.59
2	1	12	3.11	2.97
2	1	13*	1.66	0.50
2	1	14*	1.16	1.20
2	1	15*	1.41	0.55
2	1	16	2.53	2.04
2	1	17*	1.26	0.07
2	1	18*	1.65	0.04
2	2	0	24.05	24.95
2	2	1	24.39	23.10
2	2	2	2.04	2.09
2	2	3	25.70	25.07
2	2	4	16.30	17.00
2	2	5	11.45	9.54
2	2	6	4.00	5.26
2	2	7	13.00	14.79
2	2	8	7.02	0.44
2	2	9	3.53	2.72
2	2	10	4.46	4.50
2	2	11	6.89	6.50
2	2	12	3.66	4.00
2	2	13*	1.12	0.29
2	2	14*	1.75	2.65
2	2	15	2.47	2.40
2	2	16*	1.20	1.74
2	2	17*	1.27	0.31
2	2	18*	1.30	1.06
2	3	0*	0.89	2.50
2	3	1	9.08	9.34
2	3	2	2.81	3.34
2	3	3	7.12	0.20
2	3	4*	0.00	0.30
2	3	5	13.57	14.46
2	3	6	5.54	5.82
2	3	7	6.40	6.96
2	3	8	2.59	2.31
2	3	9	9.37	9.49
2	3	10	4.20	3.83

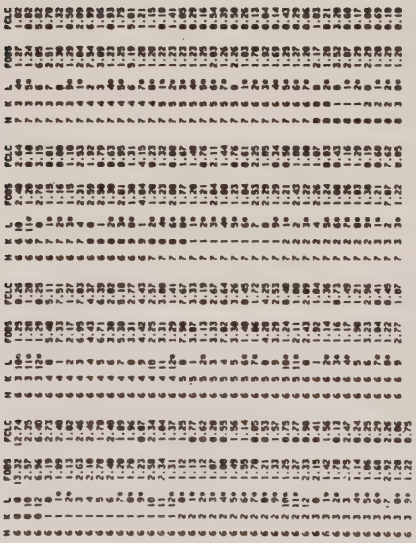
H	K	L	FOBS	FCLC
2	3	11	1.85	2.30
2	3	12	2.07	2.16
2	3	13	5.56	5.39
2	3	14*	1.00	1.61
2	3	15*	1.19	1.02
2	3	16*	1.61	1.30
2	3	17	2.64	2.85
2	3	18*	1.31	0.43
2	4	1	21.95	19.66
2	4	2	3.90	3.25
2	4	3	13.01	10.00
2	4	4	6.05	5.50
2	4	5	18.14	17.39
2	4	6	4.90	4.26
2	4	7	3.21	3.27
2	4	8*	1.11	1.59
2	4	9	11.11	11.44
2	4	10	2.90	2.31
2	4	11*	1.07	1.39
2	4	12*	1.10	0.45
2	4	13	7.07	7.14
2	4	14	2.32	1.21
2	4	15*	1.20	1.00
2	4	16*	1.59	0.64
2	4	17	3.07	3.07
2	4	18*	1.29	0.53
2	5	0	0.72	0.87
2	5	1*	1.13	0.36
2	5	2	4.19	4.64
2	5	3*	0.89	0.90
2	5	4	6.31	6.36
2	5	5	1.79	0.41
2	5	6	6.77	7.00
2	5	7*	0.93	1.24
2	5	8	5.01	5.55
2	5	9*	1.01	0.44
2	5	10	4.40	4.79
2	5	11*	1.07	1.75
2	5	12	4.71	4.85
2	5	13*	1.14	1.00
2	5	14*	1.10	2.09
2	5	15*	1.20	1.25
2	5	16	2.76	3.01
2	5	17*	1.20	0.97
2	6	0	90.00	90.06
2	6	1	6.17	6.20
2	6	2*	0.81	0.29
2	6	3	5.55	5.50
2	6	4	37.77	38.40
2	6	5	3.35	3.17
2	6	6*	1.14	0.74
2	6	7	3.59	3.11
2	6	8	19.65	20.02
2	6	9	1.06	0.62
2	6	10	2.05	0.60
2	6	11	1.91	1.73
2	6	12	0.86	0.43
2	6	13*	1.15	0.17
2	6	14*	1.10	0.39
2	6	15*	1.21	0.84
2	6	16	2.00	2.02
2	6	17*	1.07	0.22
2	7	0	35.34	35.53
2	7	1	7.19	6.09
2	7	2	5.67	5.71
2	7	3	5.60	6.31
2	7	4	28.06	29.46
2	7	5	6.43	6.01
2	7	6	9.07	9.45
2	7	7	3.79	3.62
2	7	8	16.21	16.30
2	7	9	3.16	3.27

H	K	L	FOBS	FCLC
2	7	10	6.99	7.36
2	7	11*	1.10	1.40
2	7	12	6.60	7.06
2	7	13*	1.59	1.31
2	7	14	3.60	4.15
2	8	0	21.43	20.99
2	8	1	17.10	15.05
2	8	2*	0.00	0.42
2	8	3	16.13	15.84
2	8	4	17.64	17.38
2	8	5	9.51	9.00
2	8	6*	0.97	0.76
2	8	7	10.72	11.00
2	8	8	12.00	11.03
2	8	9	3.63	4.22
2	8	10*	1.00	0.24
2	8	11	6.56	6.32
2	8	12	7.30	7.40
2	8	13*	1.10	1.64
2	9	0	11.60	10.60
2	9	1	23.54	23.17
2	9	2	2.10	1.93
2	9	3	19.03	18.90
2	9	4	0.62	0.54
2	9	5	17.10	16.70
2	9	6	3.24	3.19
2	9	7	11.34	10.72
2	9	8	4.07	4.00
2	9	9	10.45	10.22
2	9	10	2.25	2.25
2	9	11	6.10	5.72
2	9	12*	1.30	1.21
2	9	13	5.25	5.61
2	10	0	2.22	2.62
2	10	1	5.74	5.77
2	10	2	2.20	2.62
2	10	3	5.42	5.60
2	10	4	2.47	1.85
2	10	5	3.73	3.66
2	10	6	4.67	5.24
2	10	7	4.05	3.83
2	10	8*	1.34	1.22
2	10	9*	1.22	1.90
2	10	10	3.45	4.50
2	10	11	2.06	2.10
2	10	12*	1.30	1.06
2	11	0	11.75	11.03
2	11	1	10.34	9.00
2	11	2*	1.10	1.31
2	11	3	0.16	7.91
2	11	4	0.70	0.92
2	11	5	0.01	0.61
2	11	6	2.97	2.60
2	11	7	5.22	5.31
2	11	8	4.30	4.33
2	11	9	5.09	5.70
2	11	10*	1.27	2.12
2	11	11*	2.03	2.70
2	11	12*	1.31	1.46
2	12	0	16.00	16.00
2	12	1	2.61	2.10
2	12	2	3.51	1.49
2	12	3	3.32	3.42
2	12	4	14.76	14.22
2	12	5*	1.10	0.71
2	12	6	3.52	2.96
2	12	7	3.11	3.49
2	12	8	10.00	10.24
2	12	9*	1.26	0.14
2	12	10	2.53	2.21
2	12	11*	1.31	2.43
2	13	0	24.10	24.42









Meinem verehrten Doktorvater, Herrn Prof. Dr. D. Mootz, danke ich herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit, für seine stete Anteilnahme und Diskussionsbereitschaft und die großzügige wissenschaftliche und persönliche Förderung.

Allen anderen, die durch ihre Diskussions- und Hilfsbereitschaft zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, sei ebenfalls gedankt, insbesondere Herrn Dr. H. Wunderlich für Ratschläge zu Fragen der Röntgenstrukturanalyse.

Lebenslauf

Am 22.4.1950 wurde ich in Mennighüffen geboren. Meine Eltern sind der Ministerialrat a.D. Karl-Heinz Wussow und seine Ehefrau Käthe geb. Eichstaedt. Ab Ostern 1956 besuchte ich in Düsseldorf die Volksschule, von 1960 bis 1968 dann das altsprachliche Humboldt-Gymnasium, an dem ich im Mai 1968 die Reifeprüfung ablegte.

Nach Beendigung des Wehrdienstes begann ich im Wintersemester 1970/1971 an der Universität Marburg das Chemiestudium. Im April 1973 legte ich die Diplomchemiker-Vorprüfung ab. Zum Wintersemester 1973/1974 wechselte ich an die Universität Fribourg/Schweiz, zum Sommersemester 1974 dann an die Universität Düsseldorf. Nach Bestehen der Diplomchemiker-Hauptprüfung im Februar 1977 fertigte ich bis Dezember 1977 meine Diplomarbeit mit dem Titel "Über einige Kristall- und Molekülstrukturen mit tetra- und pentakoordiniertem Phosphor" unter der Anleitung von Prof. Dr. D. Mootz am Institut für Anorganische Chemie und Strukturchemie an. Anschließend begann ich am gleichen Institut mit den Arbeiten zu der vorliegenden Dissertation.

FOTODRUCK J. MAINZ — Telefon: (02 41) 2 73 05
Neupforte 13, Nähe Markt, 5100 Aachen